TREBALL FI DE GRAU

Grau en Enginyeria Química

MODELITZACIÓ I OPTIMITZACIÓ DE L'OPERACIÓ D'UNA PLANTA DE TRACTAMENT D'AIGÜES RESIDUALS INTEGRADA EN UN MERCAT D'AIGUA REGENERADA

Memòria i Annexos

Autor: Manuel Rives Jiménez
Directora: Montserrat Perez Moya
Co-Directora: Ana Somoza Tornos
Convocatòria: Maig 2019

Resum

Fa segles que el món en que vivim no funciona de manera sostenible i, de fet, cada cop ho és menys. Per tal d'aconseguir que això canviï, és necessari un procés gradual que passa per reduir, reutilitzar i reciclar tot tipus de recursos. Aquest projecte se centra en el recurs de l'aigua neta, el qual ha esdevingut un problema a nivell mundial. Més concretament, a Espanya som víctimes d'un alt índex d'estrès hídric molt per sobre de la mitjana europea, tot i tenir el mateix estil de vida. (Ridoutt i Pfister 2010)

El principal objectiu d'aquest projecte és donar resposta a la necessitat de reutilització de l'aigua residual i proposar models per a la gestió de l'aigua en un futur mercat d'aigua regenerada. És per això que s'han desenvolupat una sèrie de models en el programa GAMS, que simulen i optimitzen l'operació d'una estació de depuració d'aigües residuals en el context de la cadena de subministrament a diferents consumidors potencials d'aigua regenerada. Per facilitar la introducció de les dades i el posterior anàlisi dels resultats els models utilitzen el programa Excel com a interfície. Aquests models permetran habilitar i optimitzar l'ús de l'aigua regenerada per a reduir, dins l'àrea de l'estació, el consum d'aigua potable. També s'han proposat casos d'estudi que garanteixen el bon funcionament dels models.

Finalment, els models s'utilitzen per a simular i optimitzar una mateixa planta real i comprovar la seva validesa i la seva aplicabilitat. A més a més, es realitza una comparativa de la seva actuació i els resultats dels models.

Resumen

El mundo en el que vivimos lleva siglos funcionando de una manera no sostenible y, de hecho, cada vez lo es menos. Para conseguir que esto cambie, es necesario un proceso gradual que pasa por reducir, reutilizar y reciclar todo tipo de recursos. Este proyecto se centra en el recurso del agua limpia, que se ha convertido en un problema a nivel mundial. En concreto, en España somos víctimas de un alto índice de estrés hídrico muy por encima de la media europea, con el mismo estilo de vida. (Ridoutt i Pfister 2010)

El principal objetivo de este proyecto es dar respuesta a la necesidad de reutilización del agua residual y proponer modelos para la gestión del agua en un futuro mercado de agua regenerada. Para ello, se desarrollan una serie de modelos en el programa GAMS que simulan y optimizan la operación de una estación de depuración de aguas residuales en el contexto de la cadena de suministro a diferentes consumidores potenciales de agua regenerada. Pere facilitar la introducción de los datos y el posterior análisis de los resultados los modelos utilizan el programa Excel como interfaz. Estos modelos permitirán habilitar y optimizar el uso de agua regenerada para reducir, en el área de la estación, la consumición de agua potable. También se proponen casos de estudio, que garantizan el buen funcionamiento de los modelos.

Por último, los modelos se usan para simular y optimizar una misma planta real y comprobar su validez y aplicabilidad. Además, se realiza una comparativa de la actuación y resultados de los modelos.

Abstract

It has been centuries since the world where we live does not function in a sustainable way. In fact, it is getting worse. So as to make this change, it is necessary a gradual process consisting on reducing, reusing and recycling all kind of wastes. This project focuses on a specific resource: the net water, which has become a global problem. In particular, in Spain we are the victims of a high index of hydric stress above the European average, when having a similar way of living. (Ridoutt i Pfister 2010).

The main purpose of this project is to provide an answer to the necessity of reusing residual water and to propose models for the water management in a future regenerated water market. Thus, a number of models have been created in GAMS software in order to simulate and optimise the operations of a sewage plant in the supply chain framework of potential regenerated water consumers. These models will allow the use of regenerated water to be enabled and optimized, in order to reduce the consumption of drinking water inside the plant area. Moreover, case studies have been proposed in order to guarantee a proper performance of the models.

Finally, these models are used to simulate a real sewage plant and check its validity and applicability. Furthermore, a comparative on its performance and its results has been carried out.

Agraïments

Primer de tot, agrair als integrants del grup CEPIMA per facilitar els seus recursos, coneixements i temps per fer possible aquest treball. En concret gràcies a la tutora del projecte, la Montserrat Pérez.

Gràcies en especial al professor Moisès Graells per, tot i no ser el meu tutor, oferir el seu valuós temps desinteressadament per guiar els aspectes més estratègics del treball.

En el dia a dia, moltíssimes gràcies a l'Ana Somoza per el seu interès genuí en el projecte, així com la seva ajuda fins i tot transoceànica.

En el terreny personal, gràcies a família i amics per aguantar-me i ajudar-me.

Índex

1. Introducció

1.1. Objectius del treball

Aquest treball busca proporcionar una metodologia per l'anàlisi i optimització de la cadena de subministrament (*supply chain*) d'una planta de tractament d'aigües. Per aconseguir-ho es marquen els següents objectius:

- Desenvolupar un model general de programació matemàtica per a qualsevol planta de tractament d'aigües i les seves connexions.
- Optimitzar casos d'estudi per comprovar la fiabilitat de la representació de la realitat que el model proporciona.
- Utilitzar el model en el cas real de l'estació depuradora de Gavà-Viladecans i optimitzar la seva operació.
- Analitzar críticament la qualitat del model alhora d'implementar-se realment a una estació de depuració d'aigües residuals.
- Analitzar diferents escenaris de futur que permetin anticipar les decisions estratègiques que caldrà prendre en un el context d'un futur mercat d'aigua regenerada.

2. ESTACIONS DEPURADORES D'AIGÜES RESIDUALS

2.1. El problema de l'aigua

L'aigua és un recurs que tothom utilitza cada dia. I no només la utilitzem de manera directa, a través de l'aixeta, sinó també a través dels nostres aliments, elaborats amb un consum enorme d'aigua, rentant la roba, per mantenir els carrers nets, etc. Les conseqüències d'aquest consum d'aigua creixent es maximitza amb l'augment demogràfic pronosticat pels propers anys. I és que, cada any, 250 milions de persones se sumen als 7.200 milions actuals, amb la demanda d'aigua que els hi correspon. (Pimentel i Burgess 2018)

Per tal d'abastir la gran demanda d'aigua, un gran número de solucions s'estan duent a terme. A països de l'orient mitja està creixent la pràctica de la dessalinització d'aigua marina. Aquestes zones aprofiten de disponibilitat de grans quantitats d'energia, ja sigui provinent del petroli o de energia solar, que recullen a les bastes extensions de terreny. (Ahmed, Hashaikeh i Hilal 2019).

A Espanya no es disposa d'aquests recursos, així que s'opta per l'opció de l'optimització de recursos mitjançant la reutilització. Aquest és un procés lent i difícil, ja que cal realitzar importants canvis estructurals al sistema de clavegueram per poder reintroduir l'aigua regenerada per la seva reutilització. De fet, està sent tan difícil que l'any 2017 a l'Àrea Metropolitana de Catalunya (AMB) només es va reutilitzar un 3,7% de l'aigua depurada. A més, cal dir que quasi el 75% d'aquesta reutilització és responsabilitat d'una sola Estació de tractament d'Aigües Residuals (EDAR): l'EDAR Gavà-Viladecans. I és que, tot i tenir un cabal depurat menor a altres EDAR com la de Sant Feliu de Llobregat o la de Montcada i Reixac, és la que en reutilitza més quantitat. («Cicle i recursos hídrics - AMB).

2.2. Tractaments

De possibles tractaments a les EDAR n'hi ha molts. Els tractaments utilitzen diversos processos que es poden agrupar en els següents apartats:

- Processos físics: Són aquells encarregats de separar diferents fases mitjançant eines mecàniques. Els més utilitzats són (Kullenberg 2006):
    - Dilució: Simplement consisteix en utilitzar aigua, per exemple d'algun rierol o pou proper per reduir la càrrega orgànica de l'aigua a tractar.

  - Sedimentació: És el pretractament més utilitzat. Ajuda a depositar la matèria orgànica en suspensió en una fase inferior i deixa la fase superior amb baixa Demanda Química d'Oxigen (DQO).
  - Flotació: Mitjançant l'aeració (o un altre gas), bombolles de gas ascendents s'adhereixen o entren en l'estructura de les partícules, aconseguint que aquestes redueixin la seva gravetat específica, elevant-se fins flotar.
  - Centrifugació: Utilitza la força centrífuga s'accelera el procés natural de sedimentació, amb el cost energètic associat.
  - Filtració: Igual que en la sedimentació, es poden utilitzar filtres per separar sòlids en suspensió i col·loidals. Dintre d'aquesta categoria també entren la microfiltració, ultrafiltració, nanofiltració i osmosi inversa, preparades per separar mida de partícules en la mateixa fase.
- Processos tèrmics: Es divideixen en tres tipus (Grasso 2006):
  - Evaporació: Consisteix en l'evaporació o destil·lació de l'aigua a tractar, separant una "pasta" com a concentrat i vapor d'aigua, més altres substàncies volàtils, com a destil·lat. Aquests processos redueixen àmpliament la DBO_5 i DQO.
  - Combustió: En presència d'oxigen, la crema de la matèria orgànica genera diòxid de carboni i calor. En absència d'oxigen és piròlisi. Només s'utilitza per aigües amb molta concentració de matèria orgànica.
  - Llacunatge: Mitjançant grans dipòsits d'aigua, es deixa que el sòl acceleri el procés d'assecat i evaporació de l'aigua a tractar.
- Processos fisicoquímics: En aquest cas, els processos inclouen l'addició de químics per neutralitzar, flocular, precipitar, absorbir i oxidar l'aigua a tractar. (Ahmed et al. 2007)
- Processos biològics: Consisteix en utilitzar microorganismes per que digereixin els compostos químics biodegradables presents a l'aigua. En aquest cas cal tenir molta cura envers les condicions òptimes pel creixement i respiració dels organismes (anaeròbic o aeròbics). Els microorganismes anaeròbics s'utilitzen a les corrents amb més concentració de matèria orgànica, mentre que els aeròbics s'utilitzen a les corrents més netes, inclús com a pas posterior als anaeròbics. (Michael Niaounakis 2006)

Processos combinats: El tractament complet no es pot aconseguir utilitzant només un sol dels processos descrits. La combustió i la destil·lació funcionen eficientment, però consumeixen molta energia. Segons les característiques de l'aigua a tractar (contaminants principals, procedència de l'aigua, procés en el que ha estat involucrat, etc) es decidirà quins tractaments són més apropiats.

2.3. Línies de tractament

S'anomena línia de tractament a una successió de processos combinats que netegen l'aigua bruta fins uns determinats mínims. Aquestes successions poden ser molt diverses i diferents entre elles, però n'hi ha algunes que s'han consolidat com a tractaments estàndard. Alguns d'aquests tractaments són:

- Fangs activats: Aquest és un tractament convencional introduït a l'any 1967 (Beychok 1967), originalment introduït pel tractament d'aigua residual de la industria del petroli. Es tracta d'un tractament separat en dos tancs. Al primer es produeix un tractament biològic via microorganismes aeròbics o anaerobis. Aquests assimilen la matèria orgànica i la transformen en matèria mineral insoluble i nous microorganismes que es separen posteriorment per decantació, al segon tanc. En cas de que els microorganismes siguin aerobis, serà necessària l'aeració del primer tanc. En aquest tractament, els microorganismes estan lliures a l'aigua. («3.2 Biològic: Aerobi i Anabeori»)

Figura 2.1 Tanc d'aeració de tractament fangs activats ***(«3.2 Biològic: Aerobi i Anabeori»)***

- Filtres percoladors: Igual que el tractament primari, els filtres percoladors tracten l'aigua amb microorganismes. En aquest cas, però, aquests no estan lliures a l'aigua, sinó que es troben a biopelícules (filtres). Es necessari un tractament físic previ per clarificar l'aigua, eliminant part dels sòlids en suspensió, per evitar l'obturació dels filtres. *(«3.2 Biològic: Aerobi i Anabeori»)*

Figura 2.2 Filtres percoladors *(«3.2 Biològic: Aerobi i Anabeori»)*

- IFAS (Fixed-Film activated sludge): Aquest tractament és una combinació dels fangs activats i llits fixes. El procés es duu a terme a tres tancs diferents. Al primer es produeix la desnitrificació ($NO_x + MO \rightarrow N_2$) en presència de microorganismes heteròtrofs i un medi anòxic (sense oxigen lliure). Als dos següents es produeix la nitrificació, on l'amoni passa a convertir-se en òxids de nitrogen gràcies a microorganismes autòtrofs i aeròbics. Per tant, és necessària l'aeració del medi en els dos últims tancs. Degut a que els microorganismes autòtrofs són més lents en créixer i reproduir-se, es col·loquen llits fixes de suports plàstics (*media*) que amplifiquen el contacte entre l'aigua i els microorganismes i els hi dona un lloc on assentar-se. (Johnson, McQuarrie i Shaw 2012)

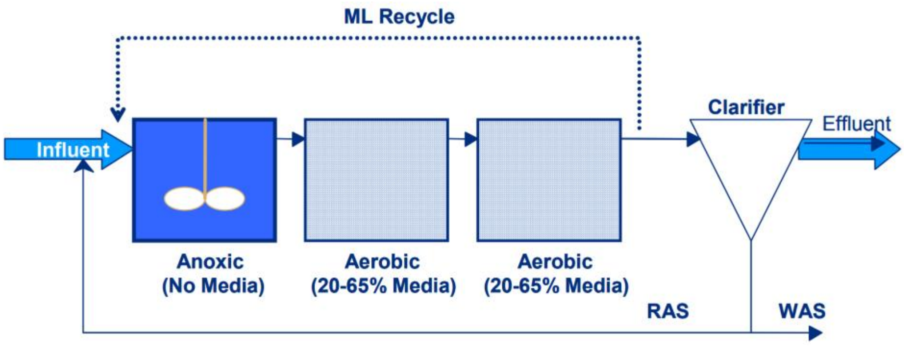


Figura 2.3 Representació del tractament IFAS (Johnson, McQuarrie i Shaw 2012)

- MBR (*Membrane Bioreactor*): Aquest tractament es basa en l'eliminació de contaminants utilitzant membranes de micro, ultra i nanofiltració. L'aigua neta i altres partícules molt petites són capaces de traspassar la membrana. El resultat és l'aigua neta o efluent. Allò que no traspassa la membrana és el la matèria orgànica i inorgànica rebutjada. Els tractaments MBR han sigut provats com a eficients eliminant un gran rang de contaminants, incloent antibiòtics, pesticides, químics industrials i nutrients. En els últims anys s'ha posicionat com una alternativa possible sobre els tractaments convencionals degut a millores en el cost de manufacturació de les membranes, en el cost d'operació i manteniment i en el control de la corrosió a la membrana (*fouling*). (Khan et al. 2018)

2.4. EDAR Gavà-Viladecans

El cas d'estudi d'aquest projecte és l'EDAR Gavà-Viladecans, situada a l'àrea metropolitana de Barcelona. A la Figura 2.4 es pot observar la disposició de les estacions depuradores en aquesta regió. Gavà-Viladecans és l'EDAR encarregada de tractar l'aigua provinent de tot el sistema 3, en taronja.

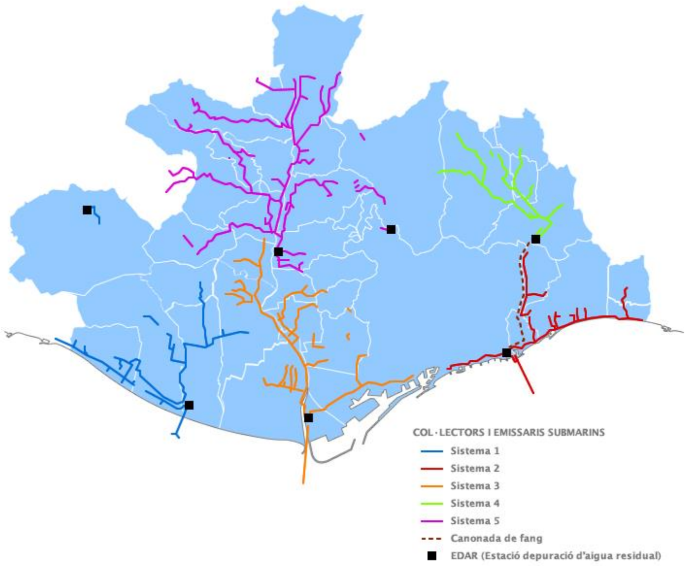


Figura 2.4 Sistemes de recol·lecció d'aigua residual («Ciclo y recursos hídricos »)

Aquesta EDAR disposa de dues línies de tractament; una de tractament IFAS i una altra de MBR. Ambdues línies comparteixen pretractament i elevació de l'aigua. En total, l'estació disposa de $64000\ {m^3}/{dia}$ de cabal de disseny, amb capacitar de 300.000 habitants equivalents. L'aigua tractada per la línia MBR, de molta més qualitat, s'inclou al mercat d'aigua regenerada i és enviada a la capçalera del sistema hídrid relacionat amb la llacuna de la Murtra. Aquest cabal correspon a la meitat del cabal total tractat. («EDAR de Gavà i Viladecans»)

L'EDAR treballa des de 1986, any de la seva primera posada en marxa, tot i que no era com actualment. I és que a l'any 1994 es va duplicar la seva capacitat. A més, entre 2008 i 2010 es va implementar l'eliminació de nutrients i la regeneració per la línia MBR. («EDAR de Gavà i Viladecans»)

3. Legislació

En el cas de les EDAR convencionals, l'aigua depurada se sol abocar al mar. Aquest punt d'abocament té una particularitat, i és que no requereix d'uns màxim de brutícia. El mar no pren accions legals si no rep l'aigua amb la qualitat que espera, ni deixa de pagar. Per tant, per evitar la sobrecàrrega de contaminants, és necessària la intervenció institucional pertinent.

Cada govern institució reguladora té les seves pròpies normes i màxims d'abocament. Aquest projecte se centra en l'àrea metropolitana de Barcelona, on es troba l'EDAR de Gavà-Viladecans. En aquest aspecte, la legislació prové de diverses fonts. Entre d'altres, l'anunci de l'AMB (Àrea Metropolitana de Barcelona 2018) sobre l'aprovació del Reglament metropolità d'abocament d'aigües residuals. D'aquest Bulletí Oficial de la Província de Barcelona se'n poden extreure les màximes concentracions del clavegueram a l'AMB.

Un altre aspecte que tracta aquest treball és el de la reutilització de les aigües una vegada depurades. Per aquest aspecte, s'ha de recórrer a la legislació espanyola, més amplia. La seva regulació ve donada pel Reial Decret 1620/2007 (Ministerio de la Presidencia. Gobierno de España 2007). Aquest RD fixa límits a la qualitat de l'aigua segons l'ús que se li doni. També classifica aquests usos en 13 categories per oferir les necessitats justes i suficients per cada ús. Aquestes classificacions s'exposen a la Taula 3.1:

Taula 3.1 Classificació Aigües Regenerades RD 1620/2007

Ús urbà		Ús Agrari			Ús industrial		Ús Recreatiu		Ús ambiental			
1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	5.1	5.2	5.3	5.4

Cada possible ús està classificat en una categoria i cada categoria té una sèrie de valors màxims admissibles per diversos contaminants que es tenen en compte. Aquests límits han de ser considerats per la modelització del mercat d'aigua regenerada.

4. Estat de l'art

4.1. Modelització

La branca de l'enginyeria química ha aportat molt a la societat. Entre d'altres, és la responsable de la creació de nous materials així com del desenvolupament de tècniques més eficients en aquesta creació. Això té com a conseqüència una millora en el nivell de vida per a la societat en general.

Aquest tipus de contribucions són evidents. No obstant, l'enginyeria química també ha aportat una nova manera d'interpretar la ciència i la tecnologia. Dins d'aquesta secció destaca el desenvolupament de la modelització. (Levenspiel 2000)

4.1.1. Simplificacions

La modelització és l'eina que permet l'abstracció de la complexitat present en la realitat, essent substituïda per una versió fins a cert punt idealitzada de la mateixa. D'aquesta manera, la realitat esdevé més fàcil d'analitzar.

Pel que fa al nivell d'idealització inherent en un cert model:

- Ha de ser suficient per garantir una gestió pràctica del model.
- Ha de tenir un límit inferior per tal de satisfer la necessitat de precisió i fidelitat envers la realitat.

Per tant, es tracta d'un compromís entre aquestes dues qualitats. Un model adequat representarà la realitat de manera precisa i senzilla dins dels estàndards dels que disposi. Això vol dir que una mateixa realitat pot ser definida mitjançant models de precisions molt diferents segons l'ús que se'ls hi vulgui donar.

En definitiva, és treball del "modelador" trobar la relació entre aquestes qualitats per tractar sempre la realitat amb el rigor necessari. Com va dir Albert Einstein: "Simplifica les coses tant com puguis, però no més". (Levenspiel 2000)

4.1.2. Modelització matemàtica

La modelització matemàtica és la traducció al llenguatge matemàtic de la simplificació de la realitat que s'ha dut a terme. S'utilitza el llenguatge matemàtic, ja que és un llenguatge estès a tot el món, entre d'altres avantatges:

- El llenguatge matemàtic és molt precís. Això simplifica la formulació d'idees complexes i la identificació de les suposicions del model.
- Les matemàtiques ofereixen també un llenguatge concís, amb regles molt definides per la seva manipulació.
- Aquest és un llenguatge que pot ser interpretat i manipulat fàcilment per ordinadors amb l'objectiu de realitzar càlculs més ràpidament.

(Rayner i Bender 2007)

4.1.3. Elements d'un model

Un model a optimitzar ha de tenir diversos components:

- Funció objectiu: Expressió matemàtica a ser maximitzada o minimitzada. Aquesta serà minimitzada quan representi costos o allò no desitjable i maximitzada quan representi beneficis o quelcom desitjable.
- Paràmetres: Conjunt de constants que defineixen el model. Per exemple, màxim de producció.
- Variables: Conjunt de valors no constants. Les variables definiran la solució del problema una vegada aquest sigui resolt.
- Regió factible: Aquest component ve definit per les restriccions, variables i paràmetres. És la regió matemàtica on les variables del model poden prendre valors com a solució del problema. La solució donada per variables fora de la regió factible no serà vàlida. Si un model té una regió factible, es diu que no és factible o que no té solució.
- Restriccions: Equacions i/o inequacions que defineixen la regió factible en què les variables poden prendre valors. En alguns casos poden ser tan restrictives que deixin una regió factible inexistent. En aquest cas es dirà que el problema no es factible, ja que no hi ha cap conjunt de variables que pugui satisfer totes les restriccions.

4.1.4. Linearitat

La linearitat és una qualitat que tenen alguns models. Un model lineal ho serà quan tant la seva funció com les seves restriccions i equacions ho siguin.

Per tant, què vol dir que una funció sigui lineal? Una funció lineal ha de poder-se definir mitjançant una aplicació lineal o homomorfisme. Aquestes han de complir una única condició:

$$\boldsymbol{f}: \boldsymbol{V} \to \boldsymbol{W}, \qquad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{\alpha u} + \boldsymbol{\beta v}) = \boldsymbol{\alpha f}(\boldsymbol{u}) + \boldsymbol{\beta f}(\boldsymbol{v}), \qquad \forall\, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{V}, \qquad \forall\, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{K} \qquad \textbf{(Eq. 4.1)}$$

Aquesta condició es pot separar en dos de ben conegudes, com son:

1. Additivitat: Quan la funció preserva la operació de la suma per a qualsevols $\boldsymbol{u}$ i $\boldsymbol{v}$.

$$\boldsymbol{f}: \boldsymbol{V} \to \boldsymbol{W}, \qquad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}) + \boldsymbol{f}(\boldsymbol{v}), \qquad \forall\, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{V} \qquad \textbf{(Eq. 4.2)}$$

2. Homogeneïtat de grau 1:

$$\boldsymbol{f}: \boldsymbol{V} \to \boldsymbol{W}, \qquad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{\alpha u}) = \boldsymbol{\alpha f}(\boldsymbol{u}), \qquad \forall \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{V}, \qquad \forall\, \boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{K} \qquad \textbf{(Eq. 4.3)}$$

(Campos 2015)

Un model serà lineal, per tant, si totes les funcions que el composen compleixen la condició expressada matemàticament a l'equació (Eq. 4.1). Això implica que el model tindrà una sèrie de qualitats que el faran més fàcil d'optimitzar. Els models no lineals també es poden optimitzar, però requeriran d'eines diferents, normalment menys efectives, que trigaran més temps en resoldre problemes similars.

D'altra banda, no sempre es modela una realitat de la mateixa manera. No només això, pot donar-se el cas de que un model lineal i un model no lineal estiguin representant una mateixa realitat. És més, dintre de ser un model no lineal, el nivell de no linearitat afectarà a la rapidesa i eficàcia de l'optimització. (Junkins i Singla 2003)

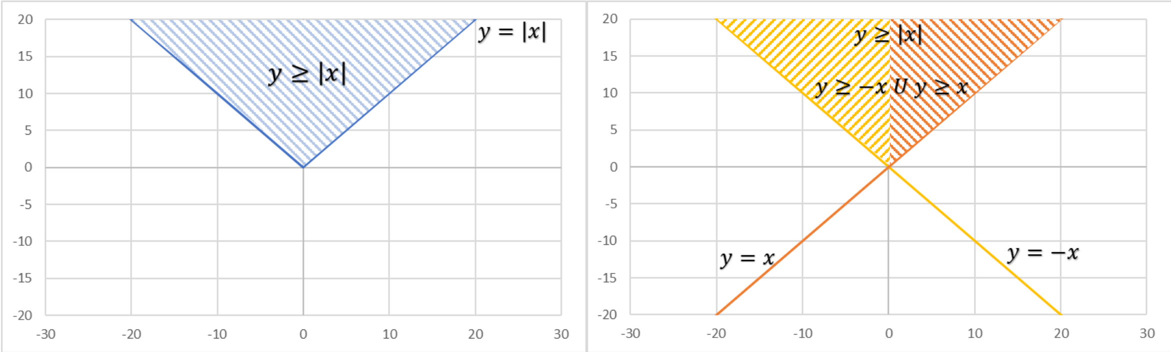
Això ens porta a la conclusió de que les no linealitats no són un atribut inherent d'un sistema físic, sinó que més aviat és molt dependent de la descripció matemàtica de la geometria, cinemàtica i dinàmica del sistema. (Junkins i Singla 2003)

Seguint en aquesta línia, hi han tècniques per tal de minimitzar, o fins i tot erradicar, aquestes no linearitats, depenent del punt de partida. Algunes d'aquestes tècniques les recull l'expert Donald Knuth, de *Massachusetts institute of Technology* ("MIT"). (Partsch i Partsch 2012)

Alguns exemples són:

1. La restricció $|x| < y$ és clarament no lineal. No obstant això, es pot representar de manera lineal fàcilment mitjançant les dues restriccions següents:
   - $x < y$: Complirà la restricció pels valors de $x > 0$.
   - $-x < y$: Complirà la restricció pels valors de $x < 0$.

La transformació es pot observar gràficament al Gràfic 4.1:



Gràfic 4.1 Transformació lineal

Això implica que un model no només no lineal, sinó que també no suau, amb la restricció original serà *equivalent* a un amb les restriccions transformades. El terme *equivalent* indica que qualsevol punt de la regió factible del model original ho serà també al transformat, i viceversa. Per tant, i com es pot observar al Gràfic 4.1, tenen la mateixa regió factible.

4.1.5. Tipus de problemes

Segons el que s'ha explicat en apartats anteriors sobre linealitat i modelització, queda clar que és important la classificació del model. Segons el tipus de model, seran necessaris uns mètodes o uns altres per resoldre i optimitzar el problema. Algunes de les classificacions bàsiques ja s'han introduït en aquest treball amb anterioritat, com el concepte de la linealitat del model o la diferenciabilitat continua (suavitat).

Aquests criteris es poden utilitzar per analitzar i categoritzar un model o programa per tal de poder-ho estudiar adequadament. Algunes d'aquestes classificacions més utilitzades són:

- Programa lineal (*Linear program, LP*): Un LP, com ja s'ha especificat, és aquell programa que no conté termes no lineals i que només està compost per variables contínues. Es tracta del tipus de problema més senzill.
- Programa amb enters (*Mixed Integer Program, MIP*): A l'igual que l'LP es tracta d'un dels problemes més senzills. No obstant això, un problema MIP es caracteritza per la presència de variables binàries, enteres o semivariables. En general, un LP es convertirà en un MIP quan s'incloguin variables discretes.
- Programa no lineal (*Nonlinear program, NLP*): Tot i que, com l'LP, només està compost per variables contínues, l'NLP conté termes no lineals en la seva definició.
- Programa no lineal amb enters (*Mixed Integer Nonlinear Program, MINLP*): Aquest programa fa referencia a aquells models que tenen tant termes no lineals com variables enteres.

- Programa restringit quadràticament (*Quadratically Constrained Program, QCP*): Es tracta d'un cas especial de programa no lineal. Es caracteritza perquè totes les no linealitats són de tipus quadràtic. Això simplifica el càlcul respecte el NLP general.
- Programa restringit quadràticament amb enters (*Mixed Integer Quadratically Constrained Program, MIQCP*): Aquest tipus de programa té com a base l'anterior QCP, però amb la capacitat d'incloure variables enteres.
- Programa no lineal discontinu (*Discontinuous Nonlinear Program, DNLP*): Així com el QCP, un DNLP parteix d'un NLP. Tanmateix, en aquest cas no es tracta d'un cas especial, sinó d'una ampliació. És a dir, un DNLP és com un NLP però que a més a més és capaç de suportar termes no suaus a la seva definició.

A continuació, a la Taula 4.1, s'inclou un conjunt de criteris per facilitar aquesta classificació:

Taula 4.1 Taula comparativa del tipus de problemes principals («Model and Solve Statements»)

	Enters	No linealitats	No linealitats quadràtics	No suaus
LP				
MIP	X			
NLP		X		
MINLP	X	X		
QCP		X	X	
MIQCP	X	X	X	
DNLP	X	X		X

4.1.6. Optimització

La modelització en sí no serveix de res. La seva funcionalitat depèn de l'ús que se li doni. Dintre d'aquest aspecte, un model pot ser utilitzar amb objectius diversos.

- Desenvolupar coneixements científics: Mitjançant expressions matemàtiques dels coneixements que es tenen actualment sobre qualsevol sistema. Així és possible tant el reafirmar els coneixements com ressaltar allò desconegut.

- Testejar els efectes dels canvis en un sistema: D'aquesta manera és possible identificar quines variables estan relacionades amb quines altres: Això obre un ventall de possibilitats alhora de anticipar-se a les reaccions que tindrà el sistema real davant les mateixes alteracions.
- En definitiva, la presa de decisions: Tota la informació que els models poden oferir serà utilitzada per actuar (o no) d'una manera o d'una altra segons més convingui. Això dona a l'usuari d'un model l'habilitat de saber d'avantmà les conseqüències de les seves decisions.

(Rayner i Bender 2007)

Per la darrera, la presa de decisions, l'objectiu serà la decisió que més valor aporti al sistema. Aquest valor aportat per una decisió es tindrà en compte mitjançant la funció objectiu (4.1.3).

S'intentarà, llavors, trobar la solució al problema (en cas de que disposi de graus de llibertat) que més valor tingui, ja sigui maximitzant o minimitzant la funció objectiu. Aquest procés és el que es coneix com optimització. Evidentment, la solució òptima ha de trobar-se dins de la regió factible i, per tant, satisfer totes les restriccions i equacions.

Com s'ha comentat a l'apartat 4.1.2, un avantatge de la programació matemàtica d'un model és la velocitat de càlcul que es pot obtenir amb ordinadors. Seguint aquesta idea, nombrosos algoritmes per la optimització de models han sigut desenvolupats en els últims anys. Aquests algoritmes són coneguts com a *solvers* (solucionadors en anglès).

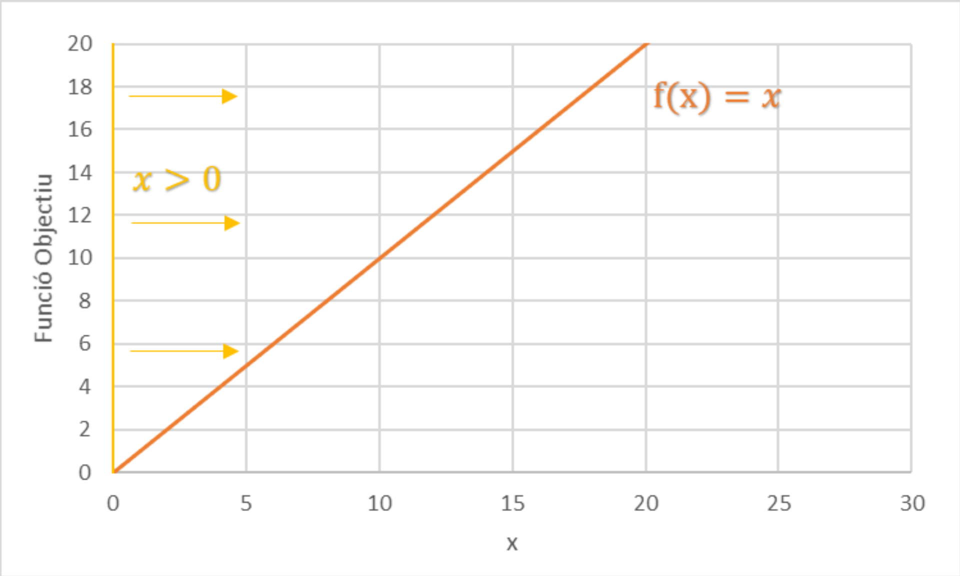
El treball del *solver* consisteix en trobar la solució òptima pel model en el menor temps possible. Aquí entren en joc, per tant, altres variables, tals com el temps de càlcul requerit per l'ordinador per trobar l'òptim (CPUs). També es requerirà que el *solver* sigui conscient de la qualitat del resultat que està donant. D'aquesta manera, l'usuari pot tenir la certesa de que si el resultat rebut és una solució factible qualsevol, una aproximació a l'òptim, un òptim local, l'òptim local, etc.

Sobre els diferents tipus de *solvers* es parla més endavant, a l'apartat 5.2.

També es pot donar el cas en el que l'òptim no existeixi, o més aviat, que es trobi a l'infinit. Per exemple:

$$Max\ f(x) = x;$$
$$subject\ to\ x > 0$$
(Eq. 4.4)

Per aquest senzill model és fàcil visualitzar que la funció $f(x)$ a maximitzar no està acotada superiorment. Per tant, la seva regió factible serà infinita, tal com es mostra al següent Gràfic 4.2:



Gràfic 4.2 Funció objectiu no acotada

L'optimització portarà a maximitzar x, degut a que la funció objectiu és directament proporcional a la variable. Aquesta optimització no trobarà mai fi, ja que la x no està acotada superiorment i, per tant, pot prendre qualsevol valor positiu.

Aquest és un exemple d'un tipus de problema que ha d'identificar i resoldre l'optimitzador, ja sigui humà o computacional.

4.2. *Supply Chain*

La cadena de subministrament (*supply chain*) es defineix com una "xarxa d'organitzacions que estan involucrades, mitjançant connexions superiors i inferiors, en diferents processos i activitats que produeixen valor en forma de productes i serveis a mans dels consumidors finals". (Martin 2011)

En aquest aspecte, cal tenir altres idees en consideració. En primer lloc, a l'hora de considerar una cadena com a *supply chain* cal tenir en compte que ha d'estar formada per més d'una companyia. En segon lloc, cal considerar que les companyies que hi participen poden i acostumen a ser de diferents propietaris i, per tant, hi ha una certa independència entre elles. I, finalment, aquestes companyies tenen en comú el compromís d'afegir valor al corrent que circula per la *supply chain*. (Dawei 2011)

De manera intuïtiva, es pot imaginar la *supply chain* semblant a una cadena en què les anelles són les companyies. El corrent d'entrada rep valor a cada anella fins arribar a l'anella final; el consumidor. Molt simplificadament, la figura Figura 4.1 mostra una *supply chain* genèrica gràficament:

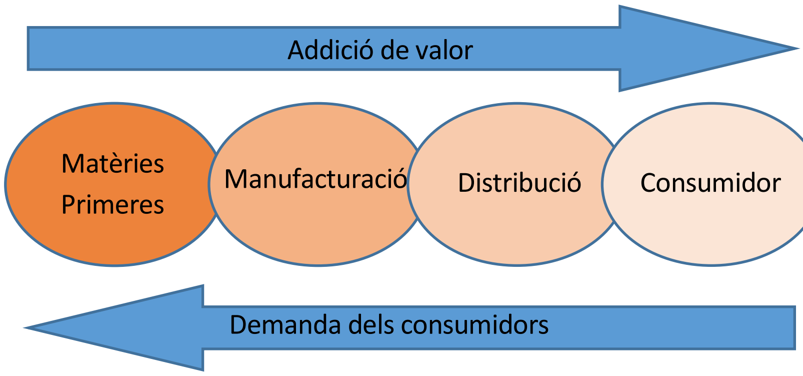


Figura 4.1 Model genèric d'una supply chain, (Dawei 2011)

En la realitat, els casos tan senzills no són usuals. El que es sol trobar és que no es té només una matèria primera, no es té un únic consumidor, i es disposa de vàries línies de manufacturació i distribució. En el cas concret d'una línia de tractament d'aigües residuals, el diagrama pot interpretar-se com mostra la Figura 4.2 :

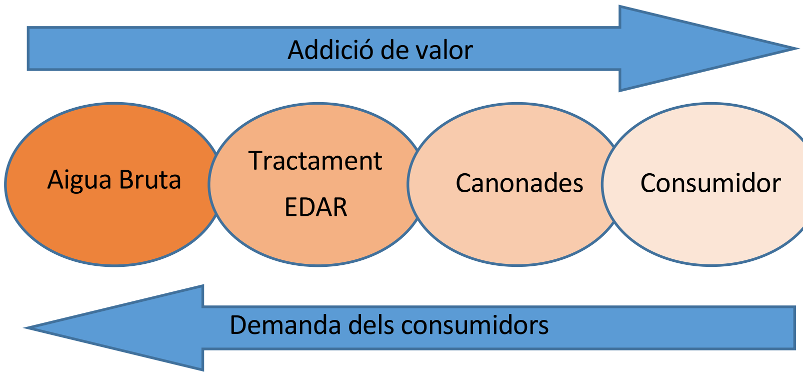


Figura 4.2. Model simplificat d'una *supply chain* per una EDAR

En el present projecte es modela la *supply chain* d'una EDAR, en la que hi ha més d'una línia de tractament així com nombroses canonades que porten el producte, l'aigua, als consumidors.

4.3. Aigua regenerada

L'aigua regenerada es defineix com aquella que prové de les estacions de tractament d'aigües residuals i que, un cop depurada, se li aplica un tractament addicional per fer-la apta per un nou ús, amb la qualitat exigida per a la nova aplicació.

Les aigües regenerades són tingudes en compte a l'hora de la gestió global dels recursos i els usos que se'n fa poden ser tant diversos com el reg, els usos ambientals, la recàrrega d'aqüífers, els usos industrials, la neteja viària, l'aigua dels dipòsits contra incendis o l'aigua d'ús en la construcció. («Aigua Regenerada | AREMA S.A»)

Tot i que l'aigua encara es manté relativament barata, és un recurs natural important que a poc a poc s'està convertint en escàs. La indústria de procés consumidora d'aigua més conservadora ni recicla ni reutilitza els corrents d'aigua. No obstant, en principi aquests corrents són aptes per la reutilització, el reciclatge i la regeneració d'aigua per disminuir la consumició d'aigua de l'industria.

Per aconseguir-ho, durant els últims 20 anys s'han estat investigant les xarxes d'aigua. En aquestes xarxes, els elements a destacar són; les unitats de procés, que són aquelles que embruten l'aigua, i les unitats de tractament, que la netegen. Totes les possibilitats de recirculació d'aigua són possibles per trobar la distribució de la xarxa òptima; aquella que minimitza el cost del procés o l'entrada d'aigua neta. (Grossmann, Martín i Yang 2014)

4.4. Superestructura

Com ja s'ha explicat a l'apartat 4.1.6, l'optimització consisteix en prendre la decisió que més convé sobre un sistema, coneixent les seves conseqüències a través de la modelització i simulació. Moltes vegades el que ocorre és que no es te constància de totes les possibles decisions que el model pot prendre. Això fa que el propi model es restringeixi a les possibilitats que el modelador ha sigut capaç de concebre.

Precisament aquest error és el que, en el cas d'una *supply chain*, supleix una superestructura. En el cas concret d'una planta de tractament d'aigua, Ignacio E. Grossman defineix la superestructura com aquella estructura que incorpora totes les alternatives factibles pel tractament, reutilització i reciclatge d'aigua. (Grossmann i Karuppiah 2006)

En aquest mateix article es presenten alguns exemples de superestructures i es demostra la seva utilitat. El procés que es segueix per obtenir la superestructura és el següent:

1. Posicionar un separador a la sortida de totes les unitats de la planta.
2. Col·locar un mesclador de corrents a la entrada de cadascuna de les unitats de la planta.
3. Fer que cada separador es connecti amb cada mesclador que sigui possible.

4.4.1. Exemple

Per exemplificar aquest procés, es presenta un cas en el que hi ha dues unitats de procés (en anglès *Process Units*, PU) on l'aigua és utilitzada i, per tant, embrutada. El cas també disposa de dues plantes de tractament d'aigua (*Treatment Units*, TU) on aquesta aigua serà netejada abans d'abocar-la al medi ambient. La disposició inicial d'aquestes unitats es la següent:

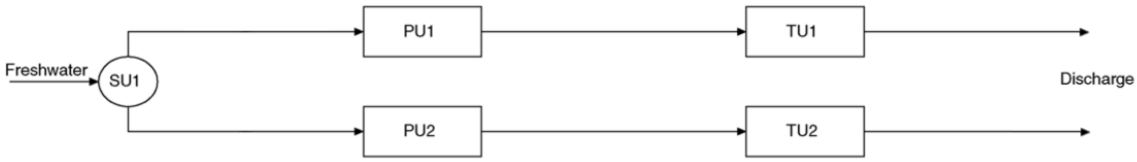


Figura 4.3. Exemple superestructura; Disposició inicial

A partir d'aquesta disposició inicial, que deixa poc lloc a l'optimització, es procedeix a seguir els passos indicats anteriorment per formar la superestructura. Primerament s'inclouen els separadors (en anglès *splitter units*, SU) al diagrama, tal com s'indica a l'apartat 1:

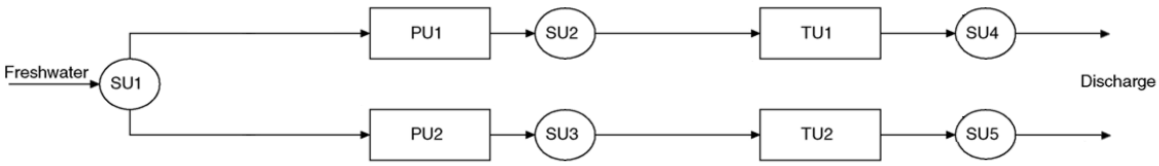


Figura 4.4. Exemple superestructura; Pas 1

Una vegada inclosos els separadors, el següent pas és el de addicionar els mescladors (*mixer units*, MU) per poder tenir més d'una entrada a cada unitat de la planta, tal com s'ha indicat a l'apartat 2:

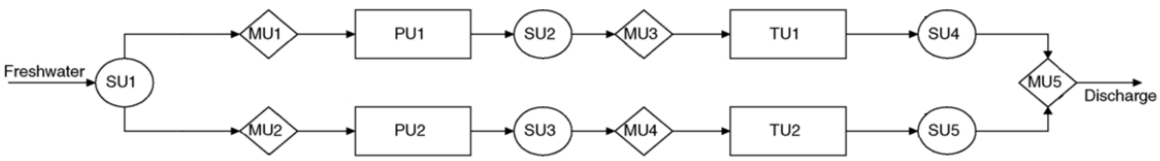


Figura 4.5. Exemple superestructura; Pas 2

Seguint amb el procés, s'addicionen totes les connexions possibles per tenir, finalment, la superestructura desitjada. (Grossmann i Karuppiah 2006)

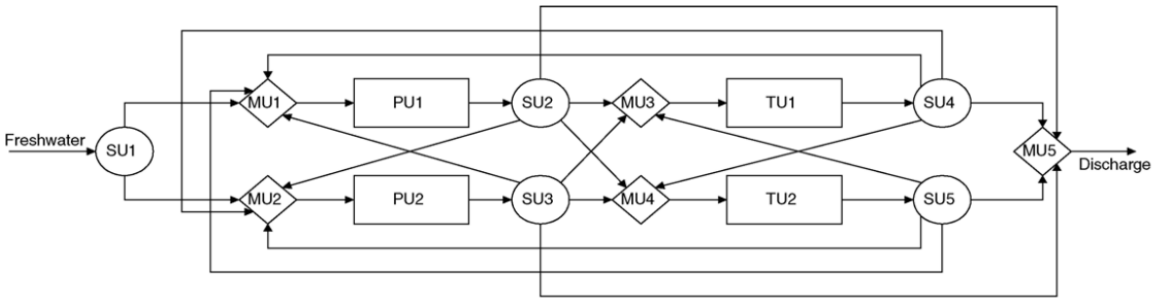


Figura 4.6. Exemple superestructura; Completa, *(Grossmann i Karuppiah 2006)*

En vista de la superestructura aconseguida i en comparació a la primera modelització proposada per la planta, és evident que la distribució final ofereix un ventall amb més possibilitat a l'hora d'optimitzar-la.

A l'article citat també s'arriba a optimitzar aquesta superestructura, retornant els valors que es mostren a la Figura 4.7:

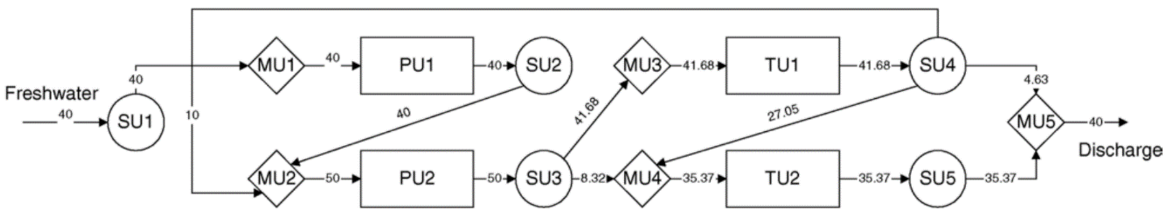


Figura 4.7. Exemple Superestructura; Optimitzada

Del resultat òptim de l'estructura se'n pot extreure la prova de que el plantejament de superestructura és vital per trobar l'òptim. Si no s'hagués seguit el procés, mai s'haurien tingut en compte com a part de la solució corrents difícils d'intuir, com ho són la recirculació de TU1 a PU2 (de SU4 a MU2) o la connexió entre PU1 i PU2 (SU2 i MU2). Per tant, en aquest cas, el plantejament d'una superestructura esdevé crucial per assolir el potencial real de la planta.

4.5. Closed loop

El concepte de closed loop ha sigut utilitzat en un gran nombre de branques d'estudi. Entre d'altres, s'utilitza en l'àmbit de l'electrònica, l'economia, l'ecologia, la comunicació i fins i tot del màrqueting. I és que es tracta d'un concepte molt ampli i multidisciplinari.

Un *closed loop* és una característica que pot tenir un model. Es considera que un model conté *closed loop* sempre i quan el producte no troba la fi del seu cicle una vegada és entregat al consumidor final. El cicle de vida del producte s'allarga reciclant-lo en etapes prèvies de la *supply chain.* Això té beneficies evidents en l'estalvi de les matèries primeres que no s'han d'introduir a la *supply chain* gràcies al reciclatge dels productes.

A la figura següent es pot observar una representació conceptual del funcionament d'una *supply chain* amb *closed loop*:

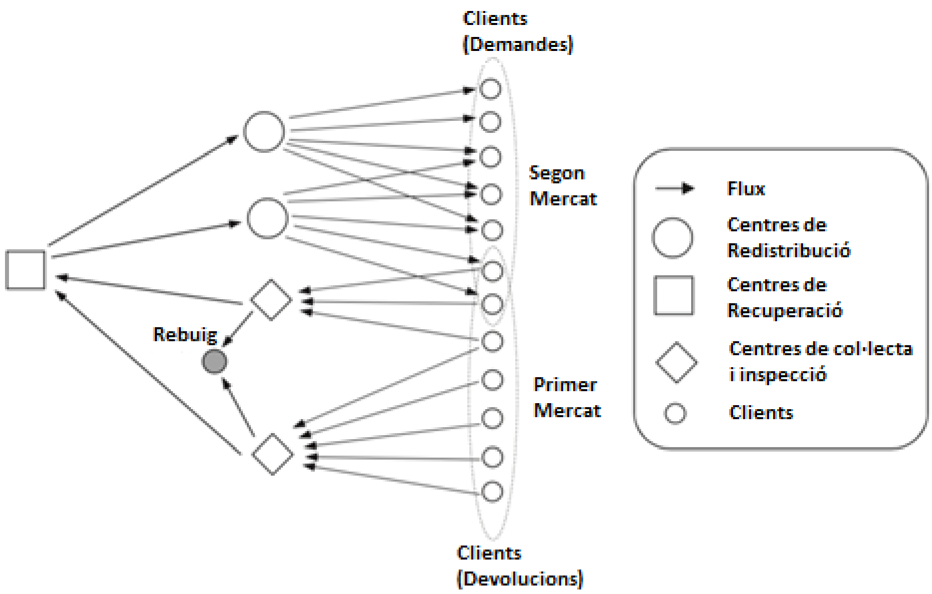


Figura 4.8 Representació conceptual: Supply Chain amb Closed Loop (Pishvaee, Rabbani i Torabi 2011)

En aquesta figura es pot observar com els productes són recol·lectats pels centres d'inspecció per avaluar el seu estat. Segons si poden ser reutilitzats, s'envien als centres de recuperació o es rebutgen. En cas de ser aptes per la reutilització, són enviats de nou al mercat pels centres de redistribució, allargant així la seva vida útil i, per tant, el seu valor aportat a la globalitat del sistema.

Ramezani dona un enfocament més ampli, ja que inclou en quins casos és necessària la reparació i en quins simplement es reutilitza el producte. A més, es diferencia entre els casos en els que la reincorporació del producte es dona als centres de distribució i els casos en els que es retorna a la planta, com a matèries primeres. (Ramezani, Kimiagari i Karimi 2014)

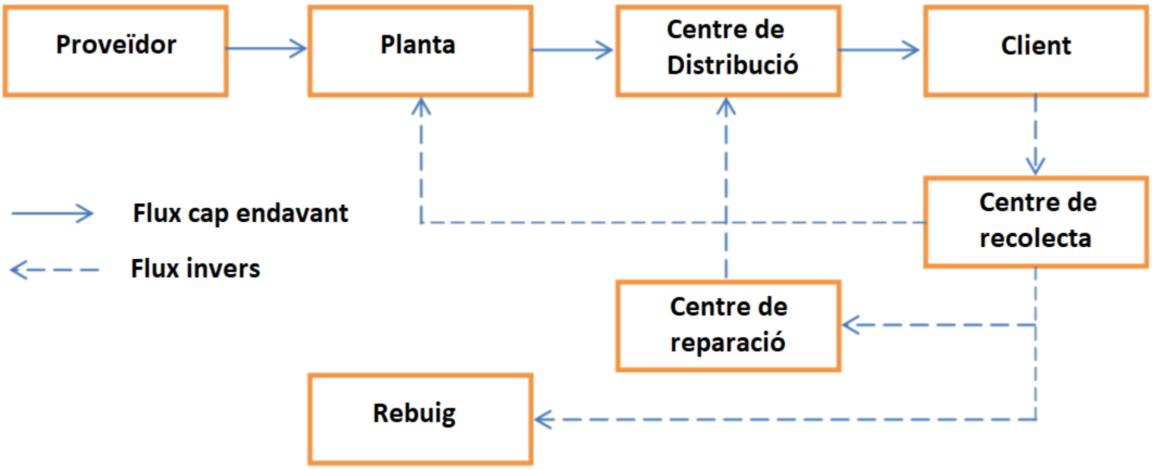


Figura 4.9 Representació Supply Chain amb Closed Loop (Ramezani, Kimiagari i Karimi 2014)

4.6. Economia circular

La idea dels cicles en sistemes reals és molt antiga i es pot intuir a varies escoles filosòfiques. No va ser fins el final de la segona guerra mundial, però, quan el concepte va tenir una remuntada. Actualment és una meta a seguir per indústries, governs i la societat en general. (Ellen MacArthur Foundation 2017)

L'economia circular és un concepte que intenta fugir del model social actual d'agafar, crear i llençar els recursos, esperant que aquesta economia lineal no tingui final. La realitat és que els recursos del planeta no són infinits en cap sentit, cosa que demostra que no hi ha altra manera de fer-los servir que no sigui circular. Consisteix en dissociar gradualment l'activitat econòmica del consum dels recursos finits i dissenyar residus fora del sistema. (Ellen MacArthur Foundation 2017)

El concepte es veu recolzat per la transició de les energies renovables, creant capital econòmic, natural i social. L'economia circular, per tant, se situa com una possibilitat atractiva per reduir la manera malbaratadora de gestionar els recursos, tancant els cicles de tractament de recursos (Haas et al. 2016). En aquest sentit, té una gran connexió amb el concepte de *closed loop*, però l'amplia a una visió global de la manera de tractar qualsevol tipus de recurs finit.

5. Selecció de les eines emprades

Amb l'objectiu de realitzar la modelització en llenguatge matemàtic, són necessàries una sèrie d'eines informàtiques que llegeixin els paràmetres, executin els models i facin visibles els resultats d'una manera entenedora pel seu posterior anàlisi.

D'eines informàtiques capaces de realitzar els processos desitjats n'hi ha moltes. Tal com s'ha explicat a l'apartat 4.1.2, la prioritat és la de modelitzar en un llenguatge matemàtic, per facilitar així la tant la realització dels models com la seva difusió.

El llenguatge, concretament, és el denominat *AML (Algebraic Modeling Language)* llenguatge algebraic de modelització. Aquests llenguatges són paquets de *software* que connecten la concepció d'un model d'optimització amb els algoritmes que busquen la solució òptima. Una de les avantatges d'utilitzar aquests softwares és que permeten descriure models de la manera simbòlica en la que pensem en ells, sense perdre la forma subjacent requerida pels algoritmes. (Fourer 2013)

Generalment, els *softwares* AML mantenen una certa independència entre el model, la informació i els *solvers*, fent possible moltes connexions amb *solvers* independents així com sistemes de gestió de dades. (Fourer 2013). Això cobreix les necessitats per la present aplicació.

Els programes més utilitzats d'aquesta categoria són AIMMS (Bisschop i Entriken 1993), AMPL (Fourer, Gay i Kernighan 1993), OPL (Van Hentenryck i Lustig 1999) i GAMS (Rosenthal 1998). D'entre aquests, s'escull utilitzar el programa GAMS (*General Algebraic Modeling System*), ja que ofereix enllaç amb una gran quantitat de *solvers*, comunicació directa amb *MS Excel*, i es disposa d'una llicència via UPC.

Figura 5.1 Logotips dels principals softwares AML

Cal mencionar que els models busquen ser versàtils; han de poder modelar una planta amb 10 línies de tractament així com una que només en tingui 2 sense massa esforç. Això impossibilita la utilització d'altres softwares de modelització com Aspen HYSYS, UniSIM o VMG. Aquests simuladors ofereixen una simulació intuïtiva i ràpida a expenses de la generalitat dels models. Qualsevol canvi en el cas d'estudi implicaria replantejar el model sencer.

5.1. GAMS

GAMS és un sistema de modelització d'alt nivell que habilita la programació matemàtica i l'optimització. Això ho realitza mitjançat dos elements («GAMS - Introduction»):

1. Un compilador del llenguatge.
2. Una sèrie de solvers que executen i resolen el model compilat.

Algunes de les avantatges de GAMS són:

- Independència entre Model i *Solvers.*

Això implica que un mateix model compilat es pot resoldre per diferents solvers, segons els requeriments específics d'aquest (veure 4.1.5). («GAMS - Introduction»)

- Independència entre Model i les dades.

Que el model i les dades siguin independents implica que un mateix model, sense necessitat d'alteració, pot ser compilat utilitzant diversos conjunts de dades. Això és precisament el que els simuladors del tipus HYSYS no permeten fer. GAMS pot absorbir un canvi estructural d'una *supply chain* modelada només afegint un element a un set; afegir una línia de tractament, un comprador o una línia de distribució sense haver de canviar el model.

GAMS pot fer servir els fitxers GDX (*Gams Data Exchange*) per rebre i llegir informació de diferents proveïdors, com poden ser *ASCII*, *Excel* o *Access*. («GAMS - Introduction»)

- Definició ordenada de manera similar a la formulació matemàtica.

La definició d'un model a GAMS es realitza d'una manera molt intuïtiva. La formulació té 5 parts diferenciades a qualsevol document de GAMS. Les seccions es clarifiquen amb imatges d'un model real obtingut a («GAMS - Simple Example»):

  - *Sets*: Conjunts d'elements que reben un tracte similar per part del model. Aquestes agrupacions simplifiquen i agilitzen les seccions posteriors.

```
Sets
       i    canning plants    / Seattle, San-Diego /
       j    markets           / New-York, Chicago, Topeka / ;
```

Figura 5.2 Definició Sets al model d'exemple GAMS («GAMS - Simple Example»)

- Dades: Paràmetres que defineixen el model, ja siguin escalars (*Scalar*), vectorials (*Parameters*) o matricials (*Table*).

```
Parameters
       a(i)  capacity of plant i in cases
         /    Seattle     350
              San-Diego   600  /
       b(j)  demand at market j in cases
         /    New-York    325
              Chicago     300
              Topeka      275  / ;
Table  d(i,j)  distance in thousands of miles
                  New-York       Chicago      Topeka
    Seattle          2.5           1.7          1.8
    San-Diego        2.5           1.8          1.4  ;
Scalar f  freight in dollars per case per thousand miles  /9
0/ ;
Parameter
       c(i,j)  transport cost in thousands of dollars per cas
e ;
c(i,j) = f * d(i,j) / 1000 ;
```

Figura 5.3 Definició de les dades al model d'exemple GAMS («GAMS - Simple Example»)

- Variables de decisió: Aquelles variables que el model manipula per arribar a la solució desitjada. Poden ser lliures (*Variable*), restringides a valors positius (*Positive Variable*), binàries (*Binary Variable*).

```
Variables
     x(i,j)  shipment quantities in cases
     z       total transportation costs in thousands of dolla
rs ;
Positive variables x ;
```

Figura 5.4 Definició de les variables al model d'exemple GAMS («GAMS - Simple Example»)

- Equacions: Restringeixen el model mitjançant igualtats i/o inequacions. Es defineix la regió factible del model (veure 4.1.3)

```
Equations
     cost         define objective function
     supply(i)    observe supply limit at plant i
     demand(j)    satisfy demand at market j ;
cost ..          z  =e=  sum((i,j), c(i,j)*x(i,j)) ;
supply(i) ..   sum(j, x(i,j))  =l=  a(i) ;
demand(j) ..   sum(i, x(i,j))  =g=  b(j) ;
```

Figura 5.5 Definició de les equacions al model d'exemple GAMS («GAMS - Simple Example»)

- *Model*: Defineix el nom del model i les equacions que se li apliquen. Per tant, un mateix fitxer pot contenir diversos models.

```
Model transport /all/ ;
```

Figura 5.6 Definició del model al model d'exemple GAMS («GAMS - Simple Example»)

- *Solve*: Es dona l'ordre de executar el model, identificat amb el seu nom, amb un determinat *solver*, definit segons les preferències de l'usuari en funció del tipus de problema. En aquesta secció també es defineix la variable que fa de funció objectiu i si l'objectiu és que maximitzi o minimitzi.

```
Solve transport using LP minimizing z ;
```

Figura 5.7 Crida al solver al model d'exemple GAMS («GAMS - Simple Example»)

– Permet escollir el *solver* que s'utilitza.

Mitjançant els *solvers options*, el modelador pot definir els *solvers* que vol executar per omissió. A més, això es pot sobreescriure per executar un *solver* en concret, independentment del tipus de problema. Això no sempre funciona, ja que molts *solvers* només funcionen per un determinat conjunt de tipus de problemes. 5.2 *Solvers*.

– Permet posar límits i punts inicials a les variables de decisió.

El fet de poder acotar les variables de decisió permet minimitzar el temps de càlcul requerit pels *solvers*. A més, també és possible proporcionar punts inicials de càlculs per agilitzar l'optimització.

5.2. *Solvers*

Hi ha una quantitat enorme de *solvers* al mercat, ja siguin de ús lliure o que requereixin llicència. En aquest cas, el present treball es centra en aquells que GAMS pot utilitzar i, més concretament, aquells que s'utilitzen en aquest projecte.

Essencialment, hi ha tres tipus de caracteritzacions per un *solver*.

– Tipus de problemes que pot resoldre. (Tipus de problemes)

Pel que fa al present projecte, els models són de dos tipus. El primer model és un NLP, mentre que els posteriors són MINLP, ja que inclouen variables binàries (Tipus de problemes).

– Globalitat. Són capaços de trobar i assegurar la solució òptima?

És molt important conèixer la qualitat de la solució trobada. Si es tracta d'un solver global, és capaç de trobar la solució òptima global i, a més, identificar-la com a tal. No obstant això, un solver global, generalment no és capaç de resoldre grans models. Els solvers locals, en canvi, poden treballar amb models molt grans, de l'ordre de 10.000 variables i restriccions. A més, si es tracta d'un model convex, un solver Local trobarà l'òptim global. Per desgràcia, encara no es pot conèixer d'avantmà si un model serà convex amb precisió. (Drud, p. Introduction)

Per resoldre aquests models, els *solvers* que s'han utilitzat són:

- CONOPT

El *solver* CONOPT (Drud) només s'utilitza al primer model, ja que només és capaç de resoldre models del tipus NLP (i DNLP). És incapaç de treballar amb enters, cosa que impossibilita la seva utilització als models posteriors al Model 1.

No obstant això, CONOPT té una aplicació més extensa del que sembla. Tot i només resoldre directament problemes tipus NLP, altres *solvers* com BARON («BARON»), SBB («SBB») i ANTIGONE (Floudas i Misener 2013) utilitzen CONOPT per resoldre els seus subproblemes, trobar punts inicials, etc.

- *Solvers* locals MINLP

En els models MINLP, el que es té en realitat es una sèrie de NLP, un per cada combinació de les variables enteres o binàries. En aquest projecte s'han utilitzat dos *solvers* locals per resoldre MINLP, amb dos enfocaments ben diferents:

- DICOPT (Grossmann et al. 2002): És un *solver* capaç de resoldre models MINLP. Això ho aconsegueix mitjançant aproximacions lineals acumulades de les funcions convexes però no linears. Aquestes aproximacions subestimen el valor de la funció objectiu i sobreestimen la grandària de la regió factible. També realitza relaxacions, que consisteixen en convertir equacions del model en inequacions, per poder acumular-les. («DICOPT», p. The Algorithm)
- SBB: Aquest *solver* busca la solució mitjançant el mètode *Branch and Bound (B&B)*. Aquest mètode es basa en l'arbre definit per les variables binàries. Cada nivell acota el model més amb una binària. L'algoritme va resolent els NLP (amb CONOPT) i descartant branques que donen una solució pitjor a una final. Es basa en el fet de que l'acotació del model, si altera el resultat, només el pot empitjorar. («SBB», p. Introduction)

Aquests dos *solvers* confien en dues coses diferents. DICOPT confia en que els MIP (relaxats des de MINLP) són ràpids de resoldre. En canvi, SBB confia en que és més ràpid resoldre molts NLP i, per tant, prescindir de les variables enteres en l'optimització. Segons el cas, un o l'altre serà millor. («SBB», p. Comparison of SBB and other MINLP *Solvers*)

- *Solvers* Globals MINLP

Per resoldre de manera inequívoca un MINLP és aconsellable recórrer a un *solver* global. En aquest cas s'han utilitzat dos:

- COUENNE (Belotti 2019): Es tracta d'un software d'accés lliure desenvolupat per COIN-OR. Resol models convexos i no convexos amb un algoritme de *Branch and*

Bound (B&B) basat en la resolució d'LP. En aquest cas resol els subproblemes NLP amb IPOPT i IPOPTH, també de COIN-OR. («Couenne»)

- BARON (Tawarmalani i Sahinidis 2005): A diferència de COUENNE, BARON no és de software d'accés lliure. Basa els seus càlculs en un algoritme *B&B*, modificat i anomenat *Branch And Reduce (B&R)* que accelera la resolució dels models. («BARON»)

5.3. Excel: GDX

Una de les avantatges que presenta GAMS és la seva manera senzilla de formular els models. Pel que fa a la introducció de dades, no ofereix la mateixa comoditat. No obstant això, GAMS té recursos per simplificar la gestió de dades.

El recurs dels fitxers GDX (*Data eXchange*) agilitza l'enviament de dades a GAMS. Amb aquesta eina se simplifica el canvi de casos d'estudi, la modificació de paràmetres puntuals, etc. Per aquestes raons, l'ús de GDX s'implementa en aquest projecte.

Com ja s'ha vist, GDX pot comunicar GAMS amb un gran nombre de programes de gestió de dades, però el que s'utilitza en aquest projecte és MS Excel. Excel és un programa àmpliament utilitzat i la moneda de canvi d'informació i dades per excel·lència. La seva utilització és prèvia i posterior a la definició dels paràmetres. Primerament, es llegeixen les cel·les i els fulls desitjats, guardant-los a un fitxer "*.gdx*" determinat. Tot seguit, després de la definició clàssica dels paràmetres a GAMS, es procedeix a la importació dels paràmetres desitjats des de l'arxiu GDX cap a GAMS. No és necessari que tots els paràmetres a GDX siguin cridats, però sí que els paràmetres cridats s'hi trobin. Informació sobre la sintaxis pot ser trobada a la web de GAMS («GAMS Data eXchange (GDX)»).

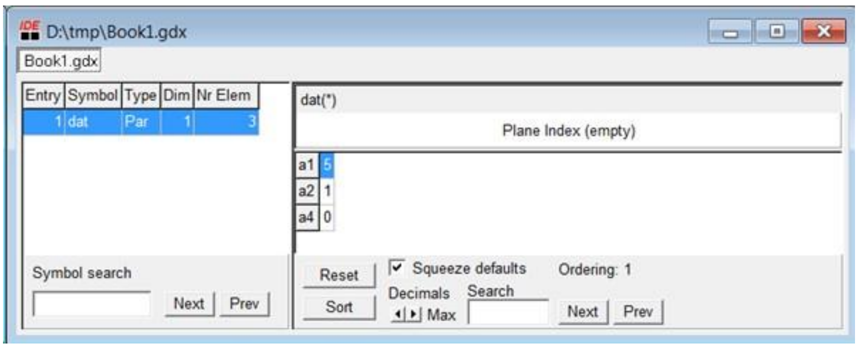


Figura 5.8 Imatge exemple d'un arxiu GDX estàndard *(«GAMS Data eXchange (GDX)»)*

Una vegada la lectura de dades queda coberta, és necessari adreçar el lliurament de dades. GAMS disposa d'un *display* intern on es poden els resultats de les variables i/o valor dels paràmetres una vegada resolt el problema. Tanmateix, aquest *display* només permet veure els valors nuus, és a dir, no ofereix comparacions, gràfics, línies de tendència... El programa que ho ofereix és novament Excel. Tot i no mostrar les gràfiques directament, Excel simplifica la creació d'aquestes.

Per sort, GAMS també té un mètode per escriure a Excel. Si no s'utilitza aquest mètode i es volen realitzar gràfics per comprendre els resultats, és necessari passar les dades una per una del *display* de GAMS (cosa que es va haver de fer pel primer model). La manera per d'escriure és mitjançant nomenclatura clàssica de programació (*loop()*, *put()*, etc.) des d'un fitxer de GAMS cap a un d'Excel prèviament especificat (de no existir o no trobar-se a la carpeta del projecte de GAMS, es crearia un nou). Una vegada escrites les variables i/o paràmetres, ja es pot operar amb Excel per analitzar còmodament els resultats obtinguts.

A més, certes comandes possibiliten escriure, a més de variables i paràmetres, estat del *solver*, estat del model, temps de càlcul utilitzat, etc, informació molt útil per analitzar el comportament del model.

6. Models

6.1. Metodologia i nomenclatura

A continuació es presenten els models elaborats en aquest projecte. Primerament es descriu el problema i la solució proposada de forma conceptual. Seguidament es formula matemàticament el model pertinent. Per acabar es planteja un cas d'estudi adequat per provar les novetats de cada model. Algunes coses a tenir en compte:

- Els subíndex en paràmetres o variables indiquen en funció de quins *sets* estan definits.
- Les unitats de treball de model són obviades, ja que els valors concrets no són importants.
- De ser necessari, els cabals es tracten amb *unitats de cabal* $(u.c.)$.
- Les concentracions de contaminants es tracten amb *unitats de contaminant per unitat de cabal* $\left(\frac{u.c.}{u.c.}\right)$.
- Els costos i beneficis en funció de cabals es tracten amb *unitats monetàries per unitat de cabal* $\left(\frac{u.m.}{u.c.}\right)$.

6.2. Model 1

Aquest model és una primera aproximació a la realitat d'una estació depuradora d'aigües residuals. El model s'executa amb GAMS però l'usuari interactua amb aquest programa principalment via dos fulls d'MS Excel; un per escriure els paràmetres de l'estació que es vol modelar i un altre per llegir els resultats.

6.2.1. Plantejament del problema

El model descriu un sistema d'una sola entrada d'aigua a depurar que pot ser repartida entre línies de tractament, cadascuna amb diferents paràmetres d'eficiència, cost, etc. Seguidament, l'aigua tractada va a parar a algun dels clients disposats a comprar-la. Aquest últim pas respon a les següents normes:

- Qualsevol línia pot enviar l'aigua que ha tractat a qualsevol client.
- Una línia pot enviar aigua a més d'un client alhora.
- Una línia ha d'enviar tota l'aigua que ha tractat.

A continuació, la Figura 6.1 representa el funcionament de la xarxa d'aigua.

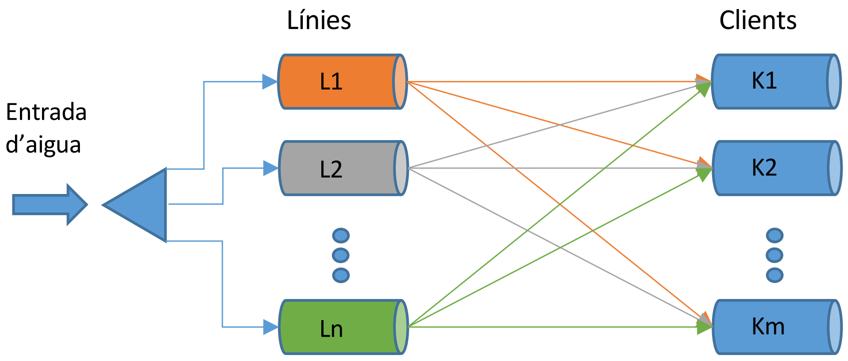


Figura 6.1. Diagrama de la xarxa

Aquest és el diagrama general del model que facilita tots els enllaços línia-client. No obstant això, és possible tancar algunes d'aquestes connexions per representar una planta que, per qualsevol raó, no sigui capaç de realitzar-les.

A continuació s'entra en detall sobre cada part del sistema.

6.2.1.1. Línies

Les línies són les unitats de tractament capaces de netejar l'aigua. El procés de neteja és definit per uns paràmetres d'eficiència propis de cada línia i cada contaminant. Això vol dir que és possible que la línia 1 tingui un rendiment d'eliminació pel contaminant 1 del 99% però del 60% pel contaminant 2. Per tant, d'aquesta línia sortirà una aigua de molta qualitat respecte el contaminant 1, però de baixa qualitat pel contaminant 2 (respecte l'entrada).

A la pràctica, les línies de tractament solen necessitar d'un flux d'aigua per mantenir els depòsits pulmó a un nivell mínim. També tenen un límit d'aigua a tractar a causa de les limitacions volumètriques de la planta. Per representar aquestes condicions s'introdueix una limitació superior i inferior al cabal que pot tractar cada línia. En cas que aquestes limitacions no siguin fidels a la realitat, només s'ha d'introduir el mínim com 0 i el màxim com un número més gran que el cabal d'entrada. D'aquesta manera el model no limitarà el cabal que entra a aquesta línia.

A l'hora de repartir l'aigua, el model requereix que tota l'aigua que tracta una línia sigui repartida entre els clients, ja sigui entre un o diversos.

El *set* introduït al model per representar les línies és el *set* $i = (L1, L2, \ldots, Ln)$.

6.2.1.2. Clients

Els clients es representen al model 1 com sortides d'aigua del sistema amb un benefici associat per unitat de cabal que se'ls envia.

Cada client té unes exigències de concentració de contaminants que l'aigua que se li envïi haurà de satisfer. Per exemple, un client molt exigent haurà de rebre l'aigua majoritàriament d'una línia molt eficient, ja que d'altra manera no podria complir amb les restriccions de qualitat.

6.2.2. Hipòtesis i limitacions

Aquest model és una aproximació matemàtica a una realitat més complexa. Per tant, s'han fet una sèrie d'hipòtesis que limiten la proximitat del model a la realitat. L'objectiu és que aquestes limitacions siguin tolerables per l'usuari del model i que, per tant, les hipòtesis no sacrifiquin la veracitat dels resultats en excés.

6.2.2.1. General

En general, el model presenta una visió idealitzada de la realitat en diversos aspectes. Entre d'altres:

1. Acumulació: Com ja s'ha vist, les EDAR fan passar l'aigua per diversos tancs que actuen de manera continua i com a dipòsits pulmó. Això implica que el nivell del dipòsit pot variar. Per tant, això provocarà que les pertorbacions al cabal d'entrada, a diferència del que mostra el model, no siguin apreciables immediatament al cabal de sortida.
2. Emmagatzematge: Aquest primer model comet la suposició de que el cabal d'entrada es constant. No només això, també assumeix que els clients no tenen pics de consum d'aigua i que, per tant, no es necessari l'emmagatzematge de l'aigua neta per part de l'EDAR.
3. Producció de fangs: La present aproximació no modela la producció de fangs associada a la depuració d'aigua. I es que s'assumeix que totes les línies produiran la mateixa quantitat de fangs, amb el mateix cost associat i el mateix benefici en la cogeneració i posterior venta en forma de biogàs.

6.2.2.2. Línies

Una hipòtesi principal que s'ha realitzat en aquest model és la de que l'aigua a l'entrada i a la sortida de les línies de tractament no varia. S'ha fet així per no entrar en detall al tractament de fangs resultants i poder centrar el present model a la distribució de l'aigua. Les plantes de tractament d'aigua residual de l'àrea de metropolitana de Barcelona produeixen, en mitjana, entre $0{,}25$ i $0{,}3\,\frac{kg}{m^3}$ d'aigua tractada.

Són unes xifres difícilment negligibles que s'haurien de tenir en compte en pròxims models. (Tenerife 2019).

D'altra banda, les línies de tractament tenen una eficiència lineal. És molt probable que aquesta eficiència varïi en funció del cabal que ha de tractar.

6.2.2.3. Clients

Al present model tracta els client com a sortides d'aigua amb un benefici i unes restriccions de qualitat. Amb aquesta representació, el model pot enviar tanta aigua com vulgui al un client sense cap restricció. Si en disposés, podria enviar aigua infinita amb benefici infinit a un client. Evidentment, aquesta solució no s'adequaria a la realitat.

S'ha de considerar la introducció d'un paràmetre representant la quantitat d'aigua que demanda cada client. El tracte d'aquest paràmetre es discuteix en models següents.

6.2.3. Formulació matemàtica

Segons els tipus de tractaments utilitzats en una EDAR, el seu funcionament pot canviar dràsticament. El mateix passa amb el número de línies, la qualitat d'aquestes, el cost del seu ús, el número de clients als que es pot enviar aigua, les seves exigències i un llarg etcètera. Amb l'objectiu d'aproximar el màxim possible el model matemàtic a l'EDAR que es vol estudiar, s'han d'especificar una sèrie de *sets* i paràmetres.

6.2.3.1. Sets

Els *sets* són conjunts que reben un tracte similar per part de les equacions del sistema. En aquest cas s'hauran de definir tres *sets* diferents:

- Línies: Conjunt de línies de les que disposa l'estació. $i = (L1, L2, \dots Ln)$
- Contaminants: Conjunt de components no desitjats que es controlen. $j = (C1, C2, \dots Cn)$
- Clients: *Set* de possibles compradors d'aigua tractada. $k = (K1, K2, \dots Kn)$

6.2.3.2. Paràmetres

Seguidament es presenten els paràmetres necessaris per a la definició d'una estació depuradora d'aigües residuals.

- $Cost_i$: Cost de utilitzar la línia i per un cabal 1.
- $MaxQ_i$: Màxim cabal que pot tractar la línia i.

- $MinQ$: Mínim cabal que pot tractar la línia i.
- B_k: Benefici que suposa el client k per un cabal 1.
- InQ: Cabal d'aigua d'entrada a tractar.
- InC_j: Concentració del contaminant j a l'entrada d'aigua a tractar.
- Ef_{ij}: Eficiència de la línia i eliminant j, en percentatge.
- $MaxC_{kj}$: Exigències de qualitat del client k pel contaminant j.

Amb aquesta sèrie de paràmetres, més els conjunts especificats en l'apartat anterior, el model queda adequat a la planta que es vol estudiar. Seguidament és necessari operar amb ells per arribar a la decisió que farà operar en condicions òptimes l'EDAR.

6.2.3.3. Variables

Una vegada parametritzada l'EDAR a estudiar, es defineixen les variables amb les que el model operarà:

- X_i: Tant per 1 del cabal d'entrada que va a la línia i.
- Qi_i: Cabal resultant de sortida de cada línia i.
- Ci_{ij}: Concentració del contaminant j a la sortida de la línia i.
- Y_{ik}: Tant per 1 del cabal de la línia i clients k.
- Ck_{kj}: Concentració del contaminant j en el corrent que va a parar al client k.
- Qk_k: Cabal que arriba al client k.

Aquestes últimes variables s'explicaran en més detall en els apartats següents.

6.2.3.4. Equacions

A continuació es detallen les equacions que calcula el model.

- *(Eq. 6.1)*: Càlcul del cabal de sortida de la línia i. Equació bàsica pel repartiment de l'aigua entre les línies de tractament mitjançant la variable X_i.

$$\boldsymbol{Qi_i = X_i \cdot InQ \quad \forall\, i} \qquad \textbf{(Eq. 6.1)}$$

- *(Eq. 6.2)*: Càlcul de la concentració del contaminant j a la sortida de cada línia i. Per fer-ho

$$\boldsymbol{Ci_{ij} = \left(1 - Ef_{ij}\right) \cdot InC_j \quad \forall\, i, j} \qquad \textbf{(Eq. 6.2)}$$

- *(Eq. 6.3)*: Càlcul del cabal del corrent que va a cada client k. S'utilitza la variable Y_{ikt} per sumar l'aigua que arriba al client k desde cada línia i.

$$\boldsymbol{Qk_k = \sum_i Y_{ik} \cdot Qi_i \quad \forall\, k}$$ ***(Eq. 6.3)***

- *(Eq. 6.4)*: Càlcul de la concentració del corrent que va a cada client k.

$$\boldsymbol{Ck_{kj} = \frac{\sum_i Ci_{ij} \cdot Qi_i \cdot Y_{ik}}{\sum_i Y_{ik} \cdot Qi_i} \quad \forall\, j, k}$$ ***(Eq. 6.4)***

6.2.3.5. Restriccions

Seguidament es presenten les restriccions a les que està subjecte el model.

- (Eq. 6.5): La suma de X_i ha de ser 1 per cada línia i. Tota l'aigua que arriba a la planta (InQ) es reparteix entre les línies. Per tant la suma dels tants per 1 de reparticions ha de sumar 1.

$$\boldsymbol{\sum_i X_i = 1}$$ **(Eq. 6.5)**

- (Eq. 6.6): El cabal que s'envia a la línia i ha d'estar entre el màxim i el mínim de la seva capacitat.

$$MinQ_i \leq Qi_i \leq MaxQ_i \quad \forall\, i$$ **(Eq. 6.6)**

- (Eq. 6.7): La suma de Y_{ik} respecte cada línia i ha de ser 1, ja que la línia ha d'enviar, entre tots els clients, la totalitat de l'aigua que ha tractat.

$$\sum_k Y_{ik} = 1 \quad \forall\, i$$ **(Eq. 6.7)**

- (Eq. 6.8): L'aigua que arriba al client k (Qk_k) ha de complir les exigències de qualitat que se li imposen. Per tant les concentracions de contaminants han de ser menors als límits dels clients

$$\boldsymbol{Ck_{kj} \leq MaxC_{kj} \;\forall\, i}$$ **(Eq. 6.8)**

Aquestes restriccions acoten la regió matemàtica on la solució és factible. Els valors que prenguin les variables hauran de satisfer totes aquestes restriccions.

Aquest no és l'únic que ha de complir la solució que doni el model. A més, d'aconseguir la "millor" solució. La manera de mesurar la qualitat d'aquesta solució es defineix al següent apartat.

6.2.3.6. Funció objectiu

Una funció objectiu és una funció que proporciona informació sobre la qualitat del resultat que dona el model. Aquesta qualitat pot dependre de paràmetres i del valor que prenguin algunes variables. La resolució del model buscarà el resultat amb la millor funció objectiu, ja sigui minimitzant-la o maximitzant-la.

En el model que es presenta la funció objectiu s'ha de maximitzar. Això és degut a que els beneficis s'introdueixen positivament i els costos negativament. Aquests són:

- Benefici: Es rep de la venda d'aigua als clients. S'introdueix a la funció objectiu multiplicant el cabal enviat per el paràmetre del benefici.

$$\boldsymbol{OF_{beneficinic_k}} = \sum_{k} \{\boldsymbol{B_{kt} \cdot Q_{kt}}\} \qquad \textbf{(Eq. 6.9)}$$

- Cost: Associat a l'ús d'una línia de tractament. S'aplica a la funció objectiu multiplicant el paràmetre $Cost_i$ pel cabal que circula per la línia i.

$$\boldsymbol{OF_{cost_i}} = -\sum_{i} (\boldsymbol{Cost_i \cdot Q_i}) \qquad \textbf{(Eq. 6.10)}$$

Unint el benefici i cost en una sola funció es troba:

$$\boldsymbol{OF_{cost_i}} = \sum_{k} \{\boldsymbol{B_{kt} \cdot Q_{kt}}\} - \sum_{i} \{\boldsymbol{Cost_i \cdot Q_{it}}\} \qquad \textbf{(Eq. 6.11)}$$

6.2.4. Cas d'estudi

Es proposa el següent cas d'estudi amb l'objectiu de comprovar el bon funcionament del present model.

Aquest cas d'estudi representa una planta on hi ha dues línies diferents pel tractament d'aigua residual. La primera, L1, és menys eficient eliminant els contaminant que la segona, L2, que presenta una eficiència molt superior. Evidentment, això fa que la línia L2 sigui més cara d'utilitzar que la L1..Ambdues línies tenen un màxim de cabal que poden tractar és de 200 unitats de cabal. A la Taula 6.1 es resumeixen aquest paràmetres.

Taula 6.1 Resum Línies Cas d'estudi 1 Model 1

	$Cost_i$	$MaxQ_i$	$MinQ_i$	Ef_{ij}	C1	C2	C3
L1	1	200	4	L1	70%	70-85%	60%
L2	4	200	0	L2	99%	99%	98%

El valor que es modifica en aquest cas d'estudi per comprovar la resposta del model davant els canvis és l'Ef_{L1C2}. Aquesta es varia de 70% a 85% en intervals d'1%, resultant en 16 execucions del model.

Pel que fa als clients, també es modelen 2. Un d'ells, K2, requereix una concentració de contaminants molt baixa (aigua molt neta) en l'aigua que se li envia, mentre que l'altre, K1, no és tant exigent. Això es tradueix en un diferent benefici aportat per cada client. A la taula Taula 6.2 es resumeixen aquest paràmetres:

Taula 6.2 Resum Clients Cas d'estudi 1 Model 1

	B_K	$MaxC_{Kt}$	C1	C2	C3
K1	10	K1	300	200	500
K2	12	K2	30	40	50

Sobre la caracterització de l'entrada, l'aigua amb la mateixa concentració en tots tres contaminants, 1000 unitats per unitat de cabal. Els valors s'especifiquen a la Taula 6.3:

Taula 6.3 Resum entrada Cas d'estudi 1 Model 1

InQ		C1	C2	C3
180	InC_j	1000	1000	1000

El comportament del model que cal esperar per aquest cas d'estudi és bastant clar. La primera opció a escollir seria la de la línia barata ($L1$) satisfent al client més exigent ($K2$). Per exemple, mitjançant la restricció de *(Eq. 6.8)* i l'equació de *(Eq. 6.4*), incloent-hi el càlcul de la concentració de la Ci_{ij} de l'equació *(Eq. 6.2)*.

$$Ck_{kj} = \frac{\sum_i Ci_{ij} \cdot Qi_i \cdot Y_{ik}}{\sum_i Y_{ik} \cdot Qi_i} < MaxC_{kj} \quad \forall\, j, k \qquad \textbf{(Eq. 6.12)}$$

$$\frac{(1 - Ef_{ij}) \cdot InC_j \cdot 180 \cdot 1}{1 \cdot 180} < MaxC_{kj} \qquad i = L1, j = C3, k = K2 \tag{Eq. 6.13}$$

$$\frac{(1 - 0.6) \cdot 1000 \cdot 180 \cdot 1}{1 \cdot 180} = 400 < 50 \qquad i = L1, j = C3, k = K2 \tag{Eq. 6.14}$$

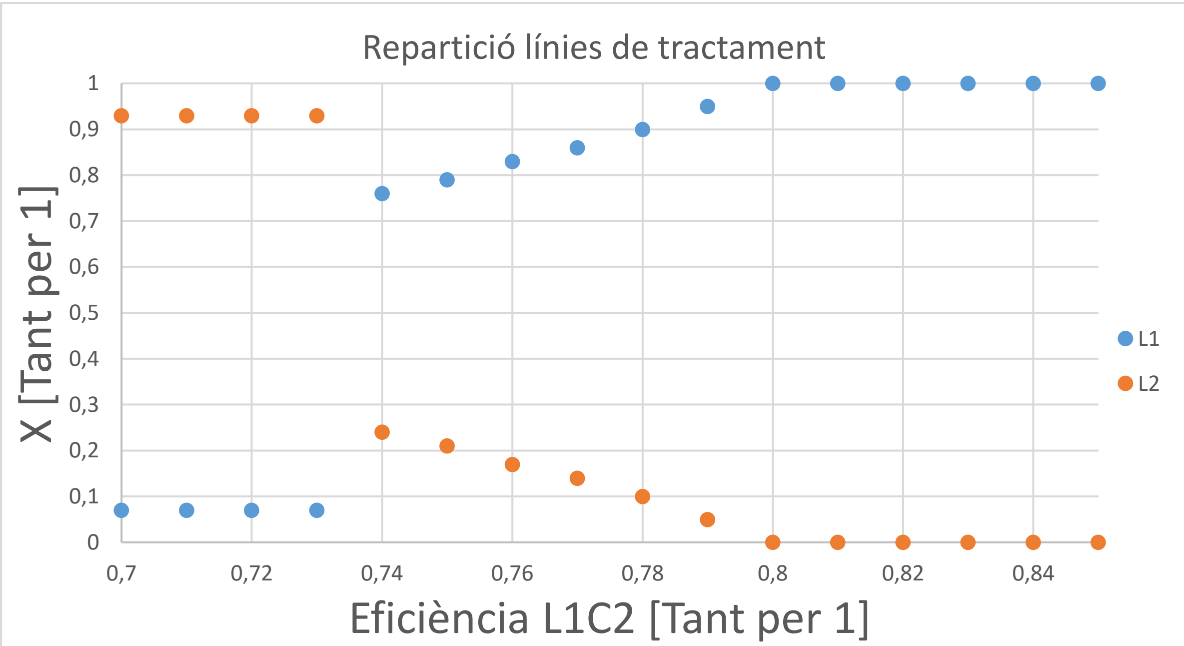
Com es pot comprovar a l'equació (Eq. 6.14), el cas d'estudi està dissenyat per que això no sigui possible. Després cal estudiar què és més econòmic de les dues opcions següents:

a) Que la línia eficient ($L2$) satisfaci al client exigent.
b) Que la línia menys eficient ($L1$) satisfaci al client menys exigent.

Segons el que sigui més econòmic, el model tendirà cap a un dels dos casos. Ara el càlcul no és tant senzill, ja que hi ha punts entremitjos que dificulten la decisió. Serà necessari recórrer al model per trobar la solució òptima.

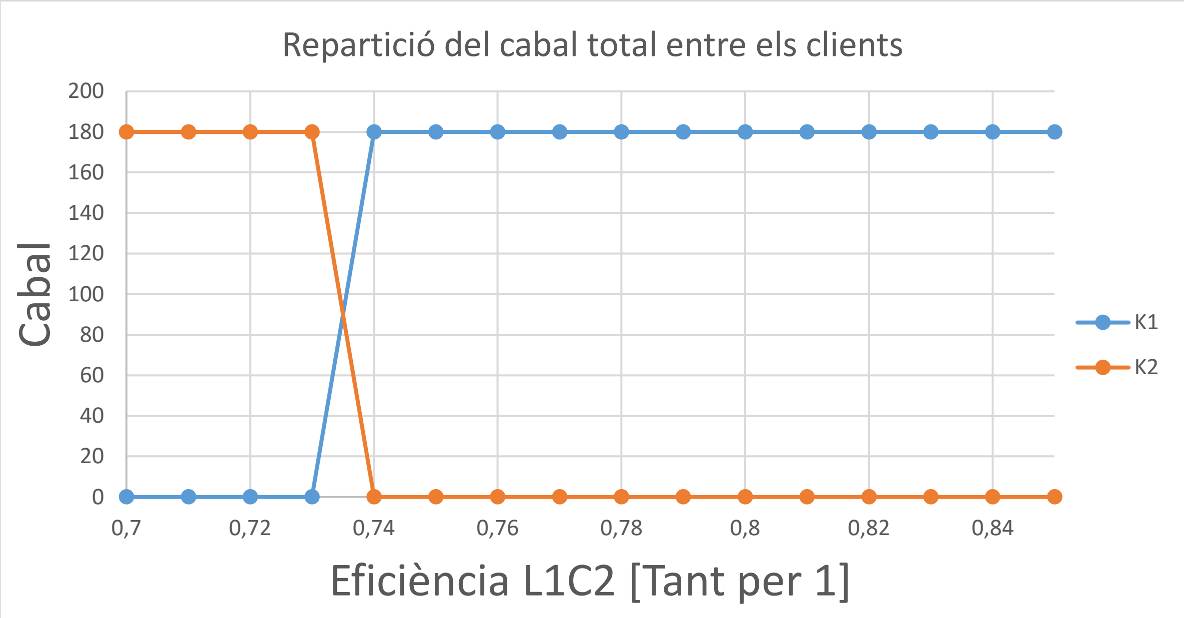
6.2.5. Resultats

Els resultats de les 16 execucions del model variant l'eficiència de la línia L1 eliminant el contaminant C2 s'exporten a un full d'Excel. En aquest full són analitzats gràficament per verificar el funcionament correcte del model. Primerament, el Gràfic 6.1 presenta la repartició d'aigua total entre les línies:



Gràfic 6.1 Repartició línies de tractament Cas d'estudi Model 1

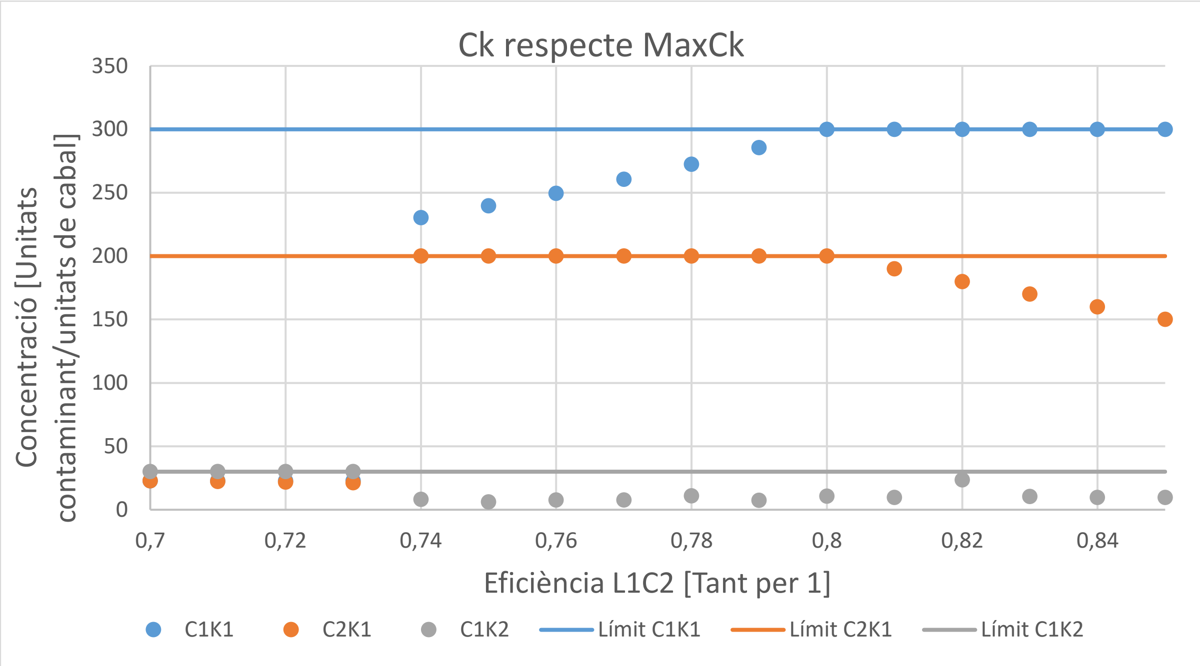
Com es pot observar, inicialment, a eficiències baixes d'eliminació la línia L1 del contaminant C2, la majoria d'aigua es tracta a la línia L2. A mesura que Ef_{L1C2} augmenta, arriba un punt en el que això s'inverteix i es passa a enviar més aigua a la línia L1. Per complementar aquesta informació, és necessari també analitzar la repartició entre els clients, que s'exposa a Gràfic 6.2:



Gràfic 6.2 Repartició entre clients Cas d'estudi Model 1

En aquest Gràfic 6.2, conjuntament amb l'anterior, s'observa com està operant el model. A partir de $Ef_{L1C2} \geq 0{,}74$, l'aigua es comença a enviar al client K1, el menys exigent. I és que, per sota d'aquesta eficiència, la línia menys eficient no és capaç de tractar l'aigua amb l'eficiència suficient com per enviar l'aigua al client $K1$ (poc exigent). És més, fins que no té l'eficiència igual a $0{,}8$ no és capaç de fer-ho. A la secció intermitja, el que passa és que L1 és capaç d'enviar aigua a K1 només amb l'ajuda de L2. A mesura que l'eficiència augmenta, cada cop és menys necessària l'ajuda de L1 (línia cara), que veu el seu cabal disminuït.

Per acabar de comprendre el que passa, el Gràfic 6.3:



Gràfic 6.3 Concentració contaminants respecte el seu màxim. Cas d'estudi Model 1

En el període inicial, el contaminant limitant pertany al client K2, al que se li està enviant l'aigua. En el període de transició, el contaminant limitant és el C2 pel client K1, ja que la L1, més cara, envia l'aigua justa per mantenir-lo al límit. Quan la L2 és capaç de tractar l'aigua pel client K1 per si sola, a partir de $Ef_{L1C2} \geq 0{,}8$, el contaminant limitant passa a ser C1, mentre el contaminant C2 és cada vegada menys crític.

Després de l'anàlisi, es conclou que els resultats tenen sentit. A més, queda demostrat que les dues possibilitats exposades a a) i b) han sigut certes segons el valor adoptat pel paràmetre Ef_{L1C2}.

6.3. Model 2

6.3.1. Plantejament del problema

El plantejament del problema pel model 2 és el mateix que en el model 1. No obstant això, integra avanços en el tractament del *set* "clients" per a una major adequació a les complexes interaccions entre una EDAR i els seus clients. A diferència del model 1, que es pren com a referència, el model 2 inclou una demanda per a cada client, així com una nova manera de enfocar la retribució que aquests aportaran a l'estació.

A més del tractament als clients, que es detallarà més endavant, s'inclou un *set* "temps" per discretitzar el temps en el que el model pot operar. Per tant, el model calcularà algunes variables i disposarà d'alguns paràmetres per cada període de temps t.

6.3.1.1. Clients

Pel model 2, cada client disposa d'una paràmetre representant la seva demanda. Aquesta demanda té unitats de cabal volumètric.

El model considera la demanda com a insatisfeta si el client rep un cabal d'aigua regenerada menor a al valor de la pròpia demanda. En cas contrari, es considerarà satisfeta quan el cabal destinat a un client determinat iguali o excedeixi el cabal indicat per la demanda.

Així com les línies tenen un cost associat, els clients tenen un benefici. Tanmateix, hi ha dos tipus de clients. Aquesta distinció es fa a través d'un paràmetre binari p:

- $p = 1$: És el client clàssic. Dona un benefici determinat depenent del cabal que se l'hi envia. Tanmateix, en superar la demanda que limita el cabal amb retribució a enviar. És a dir, que en enviar un cabal major a la demanda del client, el benefici només serà el que correspondria a enviar un cabal igual al de la demanda.
- $p = 0$: El segon tipus de client no és tan comú. Es tracta d'aquell client que requereix del valor concret de la demanda. Per tant cada unitat de cabal que difereixi de la demanda que tingui el client tindrà un cost, sigui per excés o dèficit. Per exemple, en el cas d'un client amb benefici $-10\frac{€}{m^3/h}$ i demanda de $1000\ m^3/h$, enviar $1030\ m^3/h$ tindrà un cost de $30\frac{m^3}{h} \cdot -10\frac{€}{\frac{m^3}{h}} = -300\ €$. Tot i que l'exemple és per un cas d'excés de cabal respecte la demanda, el mateix passaria en cas de dèficit.

6.3.2. Hipòtesis i limitacions

Aquest model és una aproximació matemàtica a una realitat més complexa. Per tant, s'han fet una sèrie d'hipòtesis que limiten la proximitat del model a la realitat. L'objectiu és que aquestes limitacions siguin tolerables per l'usuari del model i que les hipòtesis no sacrifiquin la veracitat dels resultats en excés.

6.3.2.1. Clients

La relació entre els clients i l'EDAR s'ha dividit en els dos clients $p = 0$ i $p = 1$. No obstant, no es tracta d'una modelització perfecta. Els tipus de client i les seves relacions amb la planta de tractament poden ser molt més complexes i no ser suficients aquests dos tipus. Per exemple, en cas de que la demanda no se satisfaci en un client de tipus $p = 1$ (o clàssic) no hi hauría repercussió negativa a la funció objectiu. Per tant es podria introduir una penalització també per no satisfer aquest tipus de client.

6.3.3. Formulació matemàtica

6.3.3.1. Sets

A part dels *sets* ja introduïts al model 1:

- Temps: *Set* de períodes de temps en els que opera la planta. $t = (t1, t2, tn)$

Es disposa d'un nou *set* temps. Això vol dir que moltes de les equacions, paràmetres i variables del model 1, tot i ser conceptualment iguals, hauran de ser reescrites per adequar-se a la nova dimensió de càlcul introduïda al present model.

6.3.3.2. Paràmetres

Els paràmetres necessaris per definir l'EDAR d'estudi pel model 2 són els següents:

- $Cost_i$: Cost de utilitzar la línia i per un cabal 1.
- $MaxQ_i$: Màxim cabal que pot tractar la línia i en un període t.
- $MinQ_t$: Mínim cabal que pot tractar la línia i en un període t.
- B_{kt}: Benefici que suposa el client k per un cabal 1. Pot variar segons el període t.
- InQ_t: Cabal d'aigua d'entrada a tractar.
- InC_{jt}: Concentració del contaminant j a l'entrada d'aigua a tractar.
- Ef_{ij}: Eficiència de la línia i eliminant j, en percentatge.
- $MaxC_{kj}$: Exigències de qualitat del client k pel contaminant j.
- P_k: Paràmetre binari que defineix el tipus de client k.
- D_{kt}: Demanda del client k el període t

6.3.3.3. Variables

Una vegada parametritzada l'EDAR a estudiar, es defineixen les variables amb les que el model operarà:

- X_{it}: Tant per 1 del cabal d'entrada que va a la línia i en el període t.
- Qi_{it}: Cabal resultant de sortida de cada línia i en el període t.
- Ci_{ijt}: Concentració del contaminant j a la sortida de la línia i en el període t.
- Y_{ikt}: Tant per 1 del cabal de la línia i clients k en cada període t.
- Ck_{kjt}: Concentració del contaminant j en el corrent que va a parar al client k.

- Qk_{kt}: Cabal que arriba al client k.
- a_{kt}: Variable binària auxiliar que indica si el client k està rebent més cabal que el que defineix la seva demanda D_{kt} ($a_{kt} = 0$) o si n'està rebent menys ($a_{kt} = 1$) en el període t.

Aquesta última variable binària canvia la resolució del problema de un NLP a un MINLP.

6.3.3.4. Equacions

Les equacions són les mateixes que les del model 1, ampliades per tenir en compte el nou *set* t.

- *(Eq. 6.1)*: Càlcul del cabal de sortida de la línia i en el període t. Equació bàsica pel repartiment de l'aigua entre les línies de tractament mitjançant la variable X_{it}.

$$\boldsymbol{Qi_{it} = X_{it} \cdot InQ_t \quad \forall\, i, t} \qquad \textbf{\textit{(Eq. 6.15)}}$$

- *(Eq. 6.2(Eq. 6.16)*: Càlcul de la concentració del contaminant j a la sortida de cada línia i. Per fer-ho

$$\boldsymbol{Ci_{ijt} = \left(1 - Ef_{ij}\right) \cdot InQ_{jt} \quad \forall\, i, j, t} \qquad \textbf{\textit{(Eq. 6.16)}}$$

- *(Eq. 6.17)*: Càlcul del cabal del corrent que va a cada client k pel període t. S'utilitza la variable Y_{ikt} per sumar l'aigua que arriba al client k desde cada línia i.

$$\boldsymbol{Qk_{kt} = \sum_i Y_{ikt} \cdot Qi_{it} \quad \forall\, k, t} \qquad \textbf{\textit{(Eq. 6.17)}}$$

- *(Eq. 6.18)*: Càlcul de la concentració del corrent que va a cada client k en el període t.

$$\boldsymbol{Ck_{kjt} = \frac{\sum_i Ci_{ijt} \cdot Qi_{it} \cdot Y_{ikt}}{\sum_i Y_{ikt} \cdot Qi_{it}} \quad \forall\, j, t} \qquad \textbf{\textit{(Eq. 6.18)}}$$

6.3.3.5. Restriccions

Així com amb les equacions, les restriccions han de ser reescrites per que tingui cabuda el *set* t.

- (Eq. 6.5) (Eq. 6.19): La suma de X_i ha de ser 1 per cada línia i i cada període t. Tota l'aigua que arriba a la planta (InQ_t) es reparteix entre les línies. Per tant la suma dels tants per 1 de reparticions ha de sumar 1.

$$\sum_i \boldsymbol{X_{it}} = \mathbf{1} \quad \forall\, \boldsymbol{t} \qquad \textbf{(Eq. 6.19)}$$

- (Eq. 6.20): El cabal que s'envia a la línia i ha d'estar entre el màxim i el mínim de la seva capacitat.

$$MinQ_i \leq Qi_{it} \leq MaxQ_i \quad \forall\, i,t \qquad \textbf{(Eq. 6.20)}$$

- (Eq. 6.21): La suma de Y_{ikt} respecte cada línia i ha de ser 1, ja que la línia ha d'enviar, entre tots els clients, la totalitat de l'aigua que ha tractat.

$$\sum_k Y_{ikt} = 1 \quad \forall\, i,t \qquad \textbf{(Eq. 6.21)}$$

- (Eq. 6.22): L'aigua que arriba al client k (Qk_k) ha de complir les exigències de qualitat que se li imposen. Per tant les concentracions de contaminants han de ser menors als límits dels clients

$$\boldsymbol{Ck_{kjt}} \leq \boldsymbol{MaxC_{kj}}\ \forall\, \boldsymbol{i,t} \qquad \textbf{(Eq. 6.22)}$$

- (Eq. 6.23) i (Eq. 6.24): Big M que assegura que a_{kt} és 1 quan la demanda no és satisfeta i que val 0 quan si que ho és.

$$(\boldsymbol{D_{kt}} - \boldsymbol{Qk_{kt}}) \leq \boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{a_{kt}} \qquad \textbf{(Eq. 6.23)}$$

$$(\boldsymbol{Qk_{kt}} - \boldsymbol{D_{kt}}) \leq \boldsymbol{M} \cdot (\mathbf{1} - \boldsymbol{a_{kt}}) \qquad \textbf{(Eq. 6.24)}$$

Per ambdós clients serà necessari que el model conegui l'estat de la demanda. Si la demanda ha sigut excedida s'haurà de tractar d'una manera diferent a si hi ha un dèficit respecte la demanda. Per exemple:

- En un client tipus $p = 1$: Si el cabal que reb el client és menor que la seva demanda el benefici d'aquest haurà d'anar multiplicat pel cabal rebut. Nogensmenys, en cas que la demanda sigui superada, l'excés no tindrà retribució; el benefici anirà multiplicat per la demanda. Es mostra a la Figura 6.2.

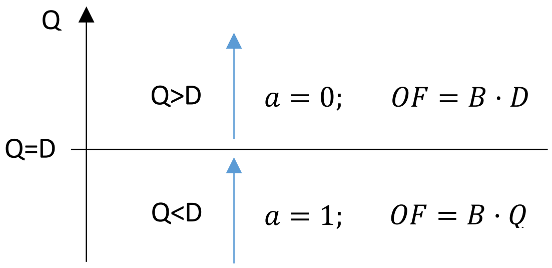


Figura 6.2. Aplicació del benefici en els clients $\boldsymbol{p = 1}$

- En un client tipus $p = 0$: En aquest cas tant l'excés com el dèficit seran penalitzats amb el benefici negatiu. Per tant és necessari, de la mateixa manera, saber la relació entre la demanda i el cabal enviat. En aquest cas serà per saber quin signe posar a la funció objectiu tal com es mostra a la Figura 6.3.

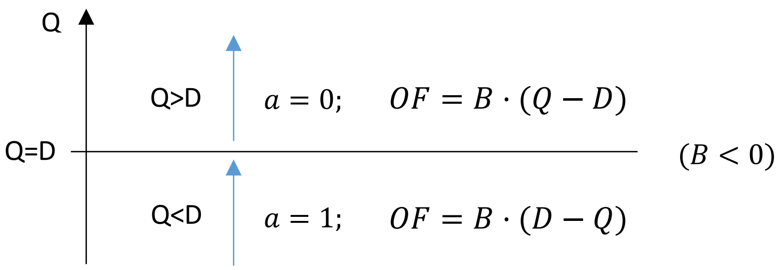


Figura 6.3. Aplicació del benefici en els clients $\boldsymbol{p = 0}$

Per tant hi han 4 casos:

1. $p = 1; \; a = 1; \; OF = B \cdot Q$
2. $p = 1; \; a = 0; \; OF = B \cdot D$
3. $p = 0; \; a = 1; \; OF = B \cdot (D - Q)$
4. $p = 0; \; a = 0; \; OF = B \cdot (Q - D)$

L'objectiu és el de aconseguir que la funció objectiu prengui el valor corresponent segons el valor del paràmetre binari p i la variable binària a. La manera més senzilla d'aconseguir-ho és la de sumar totes les opcions a la funció objectiu, aprofitant les qualitats binàries, com es mostra a l'equació (Eq. 6.25).

$$\boldsymbol{OF = B \cdot \{p \cdot \{a \cdot Q + (1 - a) \cdot D\} + (1 - p) \cdot \{a \cdot (D - Q) + (1 - a) \cdot (Q - D)\}\}} \qquad \textbf{(Eq. 6.25)}$$

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

6.3.3.6. Funció objectiu

La funció objectiu a maximitzar en aquest model és la següent:

$$\sum_{t}\left\{\sum_{k}\left\{\boldsymbol{B}\cdot\{\boldsymbol{p}\cdot\{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{Q}+(\boldsymbol{1}-\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{D}\}+(\boldsymbol{1}-\boldsymbol{p})\cdot\{\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{Q})+(\boldsymbol{1}-\boldsymbol{a})\cdot(\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{D})\}\}\right\}-\sum_{i}\{\boldsymbol{Cost_i}\cdot\boldsymbol{Q_{it}}\}\right\} \quad \textbf{(Eq. 6.26)}$$

Representa la suma dels beneficis menys la resta dels costos.

6.3.4. Cas d'estudi

Amb l'objectiu de comprovar el bon funcionament del model es posarà a prova amb dos casos d'estudi diferents. Cada cas té com a objectiu experimentar amb una de les variables de decisió. Tot i tenir més variables definides, només dues d'elles són independents. Aquestes són X_{it} i Y_{ikt}; les dues variables de repartició de l'aigua, tant entre línies com entre clients

6.3.4.1. Cas d'estudi 1

El primer cas d'estudi està enfocat a provar el correcte comportament de la variable de decisió Y_{kt}. Només es modela una línia de tractament d'aigua amb l'objectiu de suprimir la influència de la variable X_{kt}. Aquesta línia vé dotada amb una eficiència del 100% en l'eliminació de tots els contaminants per assegurar que l'aigua pot anar a qualsevol client.

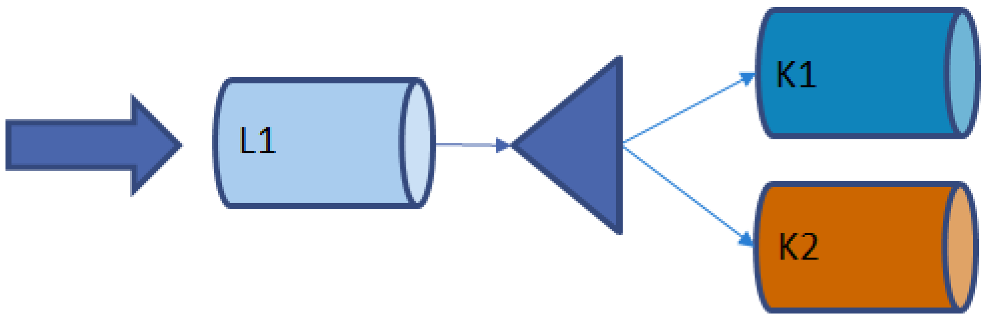


Figura 6.4 Representació gràfica Cas d'estudi 1 Model 2

Per tant, la decisió de a quin client va l'aigua dependrà del benefici que cadascun tingui. Aquest serà el paràmetre que es canviarà per veure la reacció de les variables.

Hi han dos clients; un tipus $p = 0$ i un tipus $p = 1$. Ambdós clients disposen d'una demanda a satisfer i un benefici associat. En el cas de $p = 0$, el benefici negatiu es variarà per veure quin efecte té en la repartició de l'aigua entre clients Y_{kt}. Les condicions d'aquest cas d'estudi són els mostrats a la Taula 6.4:

Taula 6.4. Condicions del cas d'estudi 1 Model 2

	K1	**K2**
Aigua a tractar InQ_t	180	
Benefici B_{kt}	$-$	10
Tipus de client p	0	1
Demanda D_k	60	180

El benefici del client $K1$ variarà segons el període t de la següent forma:

Taula 6.5. Condicions Benefici $\boldsymbol{K1}$ pel cas d'estudi 1 Model 2

	t1	**t2**	**t3**	**t4**	**t5**	**t6**	**t7**	**t8**	**t9**	**t10**	**t11**	**t12**	**t13**	**t14**	**t15**
B_{1t}	-1	-2	-3	-4	-5	-6	-7	-8	-9	-10	-11	-12	-13	-14	-15

6.3.4.2. Cas d'estudi 2

L'altre objectiu és el de provar el comportament de la variable X_{it} al model. Per fer-ho s'ha dissenyat el segon cas d'estudi, on es disposa de dues línies i dos clients tipus $p = 1$ (o clàssics).

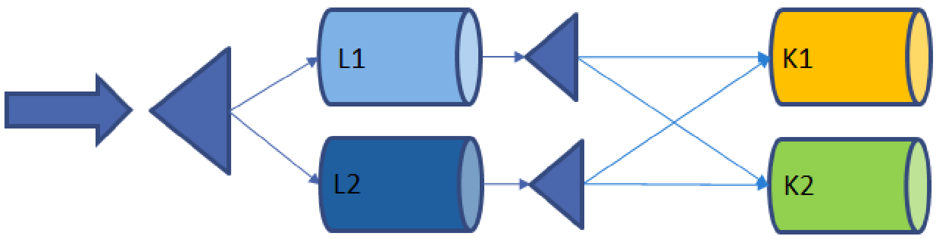


Figura 6.5 Representació gràfica Cas d'estudi 2 Model 2

L'aigua pot ser tractada a la línia 1 ($L1$) més eficientment però amb un cost alt o a la línia 2 ($L2$) amb coeficients d'eliminació més baixos però amb un cost més baix. Aquestes característiques es detallen a la Taula 6.6:

Taula 6.6. Característiques de les línies pel cas d'estudi 2 Model 1

	Eficiència (Ef_{kt})			Cost ($Cost_i$)
	$C1$	$C2$	$C3$	-
L1	0,99	0,99	0,99	1,5
L2	0,8	0,7	0,8	1

En aquest cas es prenen en consideració tres contaminants ($C1, C2, C3$). Arriben 180 unitats de cabal d'aigua a tractar per cada període de temps. Aquesta aigua entra amb una concentració InC_{jt} constant de 400, 500 i 800, respectivament. La qualitat exigida dels clients és la mostrada a la Taula 6.7:

Taula 6.7. Exigències dels clients pel cas d'estudi 2 Model 2

$MaxC_{kj}$	$C1$	$C2$	$C3$
$K1$	120	200	120
$K2$	100	50	60

Al llarg d'aquest cas d'estudi es varia el benefici per cabal d'aigua que s'envia a $K2$ de la manera que es mostra a Taula 6.8.

Taula 6.8. Condicions Benefici $K2$ pel cas d'estudi 1 Model 2

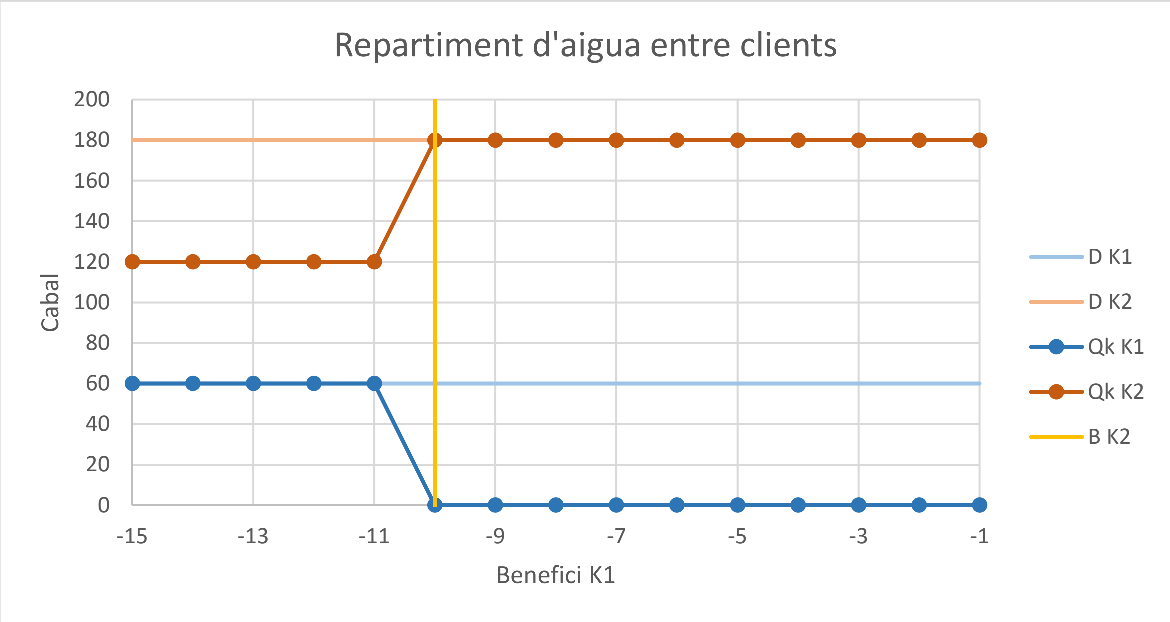
	t1	t2	t3	t4	t5	t6	t7	t8	t9	t10	t11	t12	t13	t14	t15
B_{2t}	1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14

6.3.5. Resultats

6.3.5.1. Cas d'estudi 1

El cas d'estudi 1 té l'objectiu de comprovar el bon funcionament de la variable Y_{kt}. Analitzant el donat Gràfic 6.4 es pot observar com s'ha repartit l'aigua entre els clients $K1$ i $K2$.

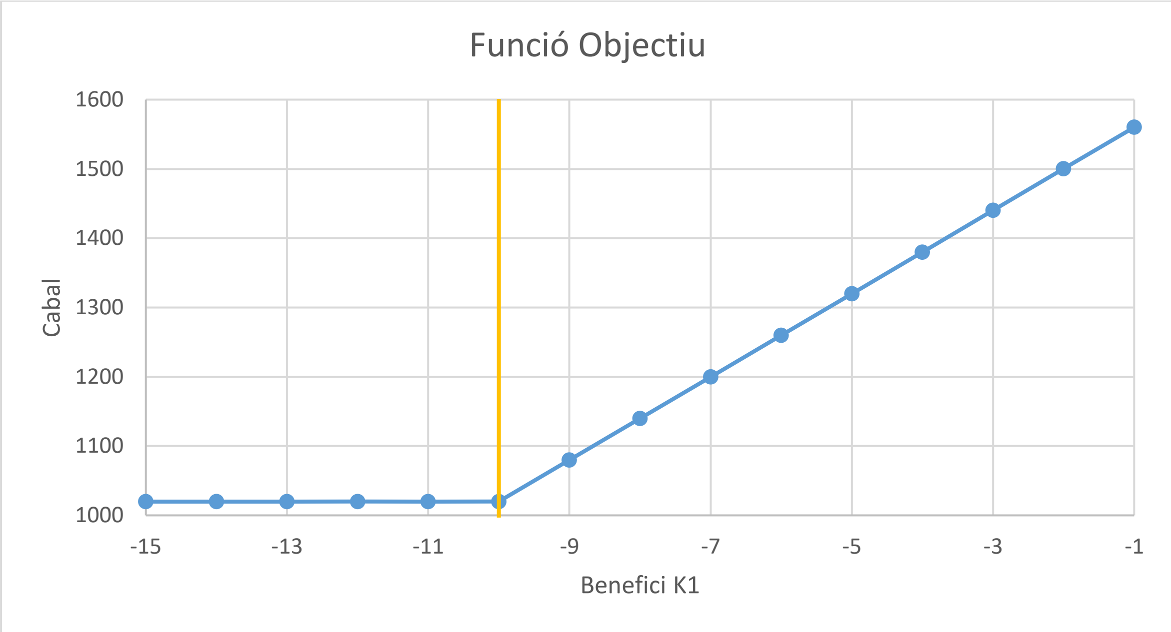
La línia vertical groga representada a l'abscissa -10 simbolitza el pas de la zona on el cost de no satisfer $K1$ és més gran, en valor absolut, que el benefici de satisfer $K2$ (zona esquerra) a la zona on el cost de no satisfer $K1$ és menor que el benefici de satisfer $K2$. Per tant aquestes són les dues zones diferenciades del cas d'estudi.



Gràfic 6.4. Repartiment d'aigua entre clients pel cas d'estudi 1 Model 2

A la zona esquerra es prioritza la satisfacció de la demanda de $K1$ i la resta d'aigua s'envia al client $K2$. Una vegada es passa a la zona dreta del gràfic s'afavoreix la demanda del client $K2$. Com en aquest cas la demanda és tan gran com l'entrada d'aigua a la planta, no hi ha aigua disponible per satisfer el client $K1$, que no en reb.

Es representa la funció objectiu del cas d'estudi 1 al Gràfic 6.5. De la mateixa manera, es diferencien dues zones a esquerra i dreta del benefici de $K2$:



Gràfic 6.5. Progresió de la funció objectiu Cas d'estudi 1 Model 2

A la zona esquerra se satisfà completament la demanda del client tipus $p = 0$ $(K1)$ i per tant no afecta a la funció objectiu. Com el benefici del client $K2$ és constant a aquesta zona, tampoc afecta a la funció objectiu. Això resulta en una funció objectiu constant fins que es comença a afavorir al client $K2$ per davant del client $K1$.

A partir de la línia on $B_{K1} = -B_{K2}$ es beneficia al client $K2$ per damunt de $K1$. A mesura que el gràfic es desplaça cap a la dreta la funció objectiu augmenta linealment degut al cost decreixent que suposa no satisfer al client $K1$.

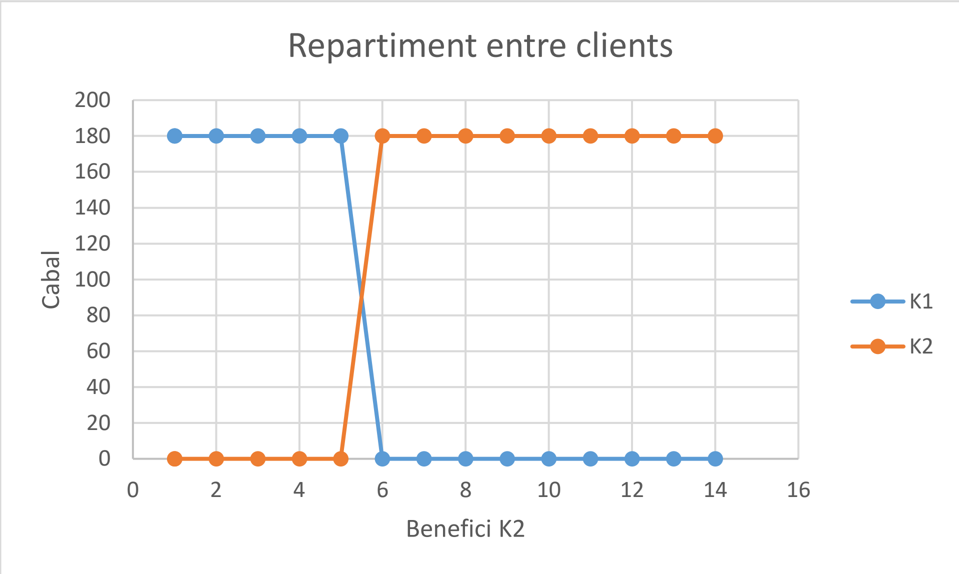
6.3.5.2. Cas d'estudi 2

Es coneix la quantitat de contaminants a l'entrada (6.3.4.2) i l'eficiència de les línies disponibles (Taula 6.6). Amb aquesta informació es calcula la qualitat a la sortida de cada línia i es mostra a la Taula 6.9.

Taula 6.9. Qualitat de l'aigua a la sortida de les línies pel cas d'estudi 2 Model 2

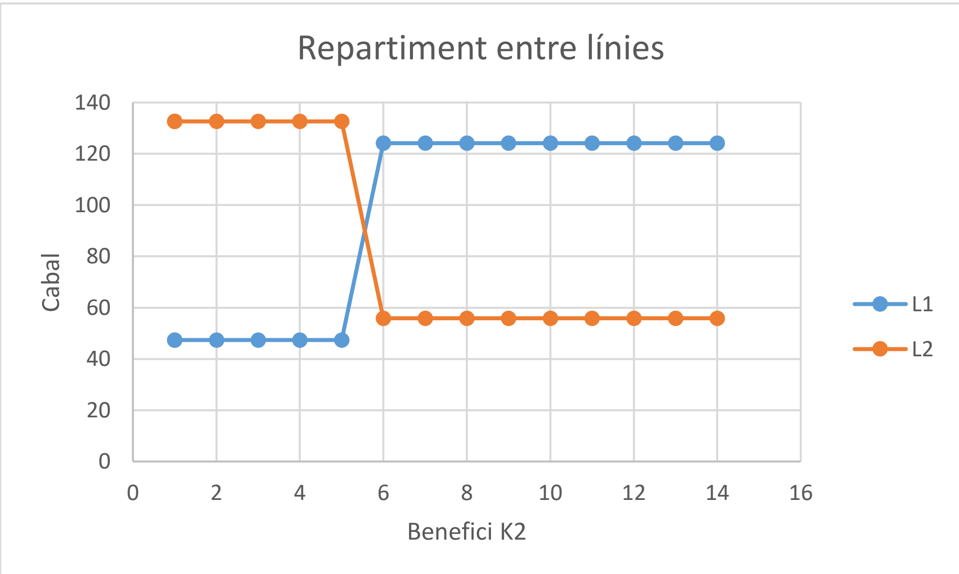
	C1	C2	C3
$L1$	4	5	8
$L2$	80	150	160

Amb aquesta informació i la obtinguda del paràmetre $MaxC_{kj}$ de la Taula 6.9 és possible preveure les relacions entre línies y clients. S'observa que la línia $L1$ pot satisfer els dos clients amb molt marge. En canvi, la línia $L2$ és de pitjor qualitat i no en pot satisfer cap per si mateixa.



Gràfic 6.6. Repartiment de l'aigua tractada entre els clients pel cas d'estudi 2 Model 2

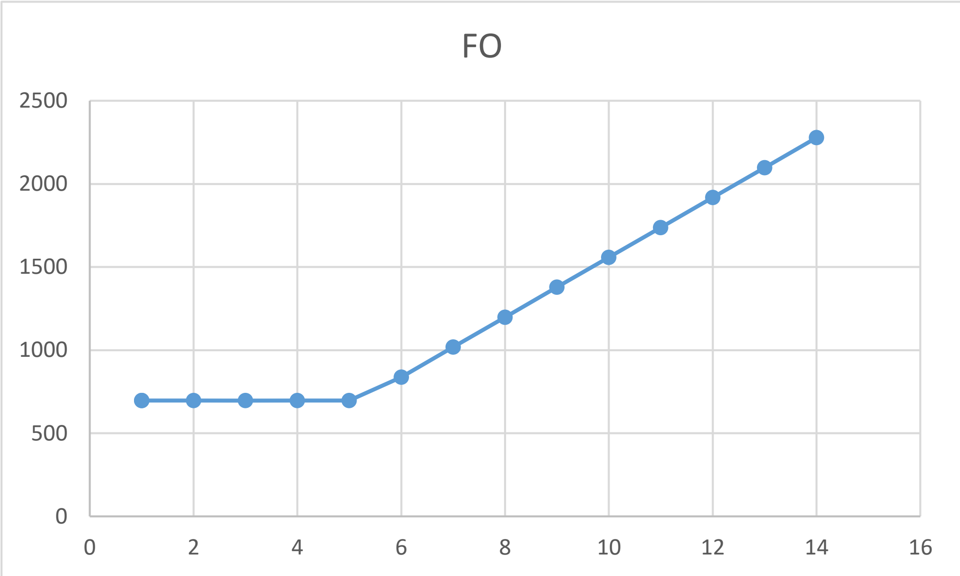
La demanda d'ambdós clients és tan gran com l'entrada d'aigua i el model tracta costos i beneficis lineals. Per tant, com es pot observar al Gràfic 6.6 en el punt en que és més profitós produir $K2$ què $K1$ es deixa d'enviar aigua a $K1$. El resultat d'aquest segon cas d'estudi respecte el repartiment entre clients és, per tant, previsible. Pel que fa als resultats respecte la variable X_{it}:



Gràfic 6.7. Repartiment de l'aigua entre les línies de tractament

A la zona esquerra del Gràfic 6.7, on se satisfà al client $K1$ (el menys exigent) la línia més utilitzada és la $L2$, que és més barata però menys eficient que $L1$. Com ja s'ha comentat, la $L2$ no és capaç de satisfer cap dels clients. És per això que, com es pot observar en el Gràfic 6.7, part de l'aigua passa per la línia $L1$ per compensar les mancances de qualitat de la línia $L2$ i complir així les exigències de $K1$.

A la zona dreta passa el contrari. Se satisfà al client $K2$, que és el més exigent. Tot i això, a partir de $B_{K2} = 6$ satisfer $K2$ resulta més profitós que satisfer al client $K1$. En aquesta zona la línia més usada és la $L1$. Tot i que pot satisfer a $K2$ totalment, part del cabal passa per $L2$. Això és degut a que la qualitat que aconsegueix $L1$ és molt superior a la requerida per $K2$. Així, s'utilitza $L2$, més barata, fins arribar a la proporció que assegura les exigències de client $K2$.



Gràfic 6.8. Funció objectiu cas d'estudi 2 Model 1

En primer lloc, la funció objectiu es manté constant degut a que el benefici del client que se satisfà ($K1$) no varia. Seguidament, a partir del canvi de client satisfet de $K1$ a $K2$, s'observa un augment progressiu de la funció objectiu a mesura que creix el benefici de $K2$.

Aquest cas d'estudi presenta problemes a l'hora de resoldre's. Per veure d'on venen aquests problemes, s'utilitza el *solver* local DICOPT (Grossmann et al. 2002) per veure quina solució troba des de diferents punts d'inici. Els punts inicials i la solució trobada per DICOPT a partir d'aquests es pot trobar a l'Annex B, diferenciats en 1B1B1 i B2. A B1 es troben els punts inicials factibles on tota l'aigua s'envia a una mateixa línia i client per tots els períodes. D'aquests, cap és capaç de guiar DICOPT cap a la solució òptima global (donada per COUENNE i mostrada a: Gràfic 6.6, Gràfic 6.7 i Gràfic 6.8)

Pel que fa a B2, presenta uns punts inicials més complexes. Per apropar DICOPT a la solució, s'inclou el canvi de client preferent que l'òptim global presenta. COUENNE situa aquest canvi quan $B_{K2} = 6$. Als punts factibles, el salt es situa a $B_{K2} = 4, 6, 7, 9$, sempre fent passar tota l'aigua per la línia *L1*. El resultat és que DICOPT troba l'òptim global en tots els casos excepte quan el canvi de client es situa a $B_{K2} = 9$.

6.4. Model 3

6.4.1. Plantejament del problema

Com bé s'ha explicat anteriorment, diferents models poden representar una mateixa realitat. Fins ara, els model 1 i 2 han representat la realitat d'una estació depuradora d'aigües residuals d'una manera similar però amb diferències conceptuals notables. En el cas del present model 3, és conceptualment igual al model 2, només diferint en l'enfocament matemàtic.

6.4.2. Formulació matemàtica

El canvi en l'enfocament matemàtic que es realitza del model 2 al model 3 és degut a les no linearitats que el primer presenta. L'objectiu és el de minimitzar el temps de càlcul requerit per les màquines que hagin d'optimitzar el model. Per aconseguir-ho, s'eliminaran algunes no linealitats del model, que són les que provoquen que s'alenteixi l'optimització.

En el model anterior, el benefici s'expressa de manera senzilla en l'equació (Eq. 6.25). Nogensmenys, no es tracta de la manera més ràpida. Les no linealitats creades són aquelles derivades de la multiplicació de la variable binària a i la variable contínua Q_{kt}. Amb l'objectiu d'evitar aquestes no linealitats, s'introdueixen les variables: $f1_{kt}, f2_{kt}, f3_{kt}, f4_{kt}$.

6.4.2.1. Sets

El model 3 té els mateixos *sets* que el model 2.

6.4.2.2. Paràmetres

El model 3 té els mateixos paràmetres que el model 2.

6.4.2.3. Variables

A part de les variables presentades al model 2:

- $f1_{kt}, f2_{kt}, f3_{kt}, f4_{kt}$: Variables auxiliars continues amb l'objectiu d'evitar no linealitats

6.4.2.4. Equacions

El model 3 té les mateixes equacions que el model 2.

6.4.2.5. Restriccions

A part de les restriccions del model 2:

6.4.2.5.1 $f1_{kt}$

Aquesta variable va multiplicada pel paràmetre p a la funció objectiu (no genera no linealitats). Ha de prendre el valor de Q_{kt} quan $a = 1$ i el valor de 0 en cas que $a = 0$. Per aconseguir-ho s'utilitza la tàctica del *big M method*:

$$f1_{kt} \leq 10^8 \cdot a_{kt} \quad \forall\, k, t \tag{Eq. 6.27}$$

$$\boldsymbol{f1_{kt} \leq Q_{kt} \quad \forall\, k, t} \tag{Eq. 6.28}$$

En cas que $a_{kt} = 0$, (Eq. 6.27) impossibilitarà que $f1_{kt}$ sigui més gran que 0. Com és un terme multiplicat per un benefici, l'optimització farà que prengui el número més alt possible, en aquest cas 0.

Quan $a_{kt} = 1$, (Eq. 6.27) dona llibertat a la variable de prendre pràcticament qualsevol valor. La limitació la donarà (Eq. 6.28), que posa el llindar al valor de $\boldsymbol{Q_{kt}}$. Aquest serà el el valor que prendrà $f\boldsymbol{1_{kt}}$ en aquest cas. Amb aquestes restriccions presents es pot introduir a la funció objectiu com es pot veure a (Eq. 6.29):

$$\boldsymbol{OF = B_{kt} \cdot p_k \cdot f1_{kt}} \tag{Eq. 6.29}$$

6.4.2.5.2 $f2_{kt}$

En el cas de $f2_{kt}$ es procedeix de manera molt similar a $f1_{kt}$. Les diferències són que en aquest cas es busca el valor de D_{kt} quan $a = 0$ i el valor de 0 en cas que $a = 1$. Seguint el mateix procediment:

$$f2_{kt} \leq 10^8 \cdot (1 - a_{kt}) \quad \forall\, k, t \tag{Eq. 6.30}$$

$$\boldsymbol{f2_{kt} \leq D_{kt} \quad \forall\, k, t} \tag{Eq. 6.31}$$

Es troba que, quan $a_{kt} = 1$, $f2_{kt}$ es veu forçada a prendre el valor de 0 degut a la (Eq. 6.30). En cas que $a_{kt} = 0$, es troba que $f2_{kt}$ té la restricció limitant a (Eq. 6.31), que li dona el valor de $\boldsymbol{D_{kt}}$.

Les dues variables auxiliars introduïdes fins aquest punt s'escriurien de la següent forma a la funció objectiu:

$$\boldsymbol{OF = B_{kt} \cdot p_k \cdot (f1_{kt} + f2_{kt})} \quad \textbf{(Eq. 6.32)}$$

6.4.2.5.3 $f3_{kt}$

L'objectiu de la variable $f3_{kt}$ és, quan $p = 0$, valer $(D_{kt} - Q_{kt})$ si $Q_{kt} < D_{kt}$ i 0 en altre cas. És important remarcar que $f3_{kt}$ anirà multiplicat per un benefici negatiu (cost) a la funció objectiu. Això vol dir que l'optimització portarà al valor més baix de la regió factible de $f3_{kt}$. Les restriccions a introduir són:

$$f3_{kt} \geq 0 \quad \forall\, k, t \quad \textbf{(Eq. 6.33)}$$

$$\boldsymbol{f3_{kt} \geq (D_{kt} - Q_{kt}) \quad \forall\, k, t} \quad \textbf{(Eq. 6.34)}$$

La diferència principal és que les restriccions són ara de "més gran o igual", degut a la tendència a la baixa de la variable $\boldsymbol{f3_{kt}}$. Si $Q_{kt} \leq D_{kt}$ (a_{kt} és igual a 1) el valor de $(D_{kt} - Q_{kt})$ és positiu, per la qual cosa la restricció limitant serà la (Eq. 6.34). En l'altre cas, quan a_{kt} és 0 i per tant $Q_{kt} \geq D_{kt}$, $f3_{kt}$ prendrà el valor de 0, el més restrictiu.

6.4.2.5.4 $f4_{kt}$

En el cas de $f4_{kt}$, es té un objectiu del mateix tipus que el de $f3_{kt}$. Quan $p = 0$ i $Q_{kt} > D_{kt}$ ha de prendre el valor de $(Q_{kt} - D_{kt})$, mentre que ha de tenir el valor de 0 quan $Q_{kt} < D_{kt}$. Per aconseguir-ho s'utilitzen les dues restriccions següents:

$$f4_{kt} \geq 0 \quad \forall\, k, t \quad \textbf{(Eq. 6.35)}$$

$$\boldsymbol{f4_{kt} \geq (Q_{kt} - D_{kt}) \quad \forall\, k, t} \quad \textbf{(Eq. 6.36)}$$

De mateixa manera que a l'apartat anterior, sempre que Q_{kt} sigui més gran que D_{kt}, la restricció limitant serà la de (Eq. 6.36). D'altra manera, la restricció limitant serà la de (Eq. 6.35), que farà que $f4_{kt}$ prengui el valor de 0.

La funció objectiu, pel que fa a els últims dos apartats, es pot escriure com en el cas anterior:

$$\boldsymbol{OF = B_{kt} \cdot (1 - p_k) \cdot (f3_{kt} + f4_{kt})} \quad \textbf{(Eq. 6.37)}$$

6.4.2.6. Funció objectiu

En el model que es presenta la funció objectiu s'ha de maximitzar. Això és degut a que els beneficis s'introdueixen positivament i els costos negativament. Aquests són:

- Benefici: Es rep de la venda d'aigua als clients clàssic (de tipus $p = 1$). S'introdueix a la funció objectiu amb les variables auxiliars $f1_{kt}$ i $f2_{kt}$, com s'ha demostrat a (Eq. 6.32).
- Cost: N'hi han de dos tipus:
  - Cost associat a l'ús d'una línia de tractament. S'aplica a la funció objectiu multiplicant el paràmetre $Cost_i$ pel cabal que circula per la linia i.

$$\boldsymbol{OF_{cost_i}} = -\sum_{t}\sum_{i}(\boldsymbol{Cost_i} \cdot \boldsymbol{Q_{it}}) \qquad \textbf{(Eq. 6.38)}$$

  - Cost derivat de no satisfer la demanda d'un client de tipus $p = 0$. S'utilitzen el benefici negatiu introduït com a paràmetre i les variables $f3_{kt}$ i $f4_{kt}$ com s'ha mostrat a l'equació (Eq. 6.37).

Unint els beneficis i costos en una sola funció es troba:

$$\boldsymbol{OF_{cost_i}} = \sum_{t}\left\{\sum_{k}\{\boldsymbol{B_{kt}} \cdot (\boldsymbol{p_k} \cdot (\boldsymbol{f1_{kt}} + \boldsymbol{f2_{kt}}) + (\boldsymbol{1} - \boldsymbol{p_k}) \cdot (\boldsymbol{f3_{kt}} + \boldsymbol{f4_{kt}}))\} - \sum_{i}\{\boldsymbol{Cost_i} \cdot \boldsymbol{Q_{it}}\}\right\} \qquad \textbf{(Eq. 6.39)}$$

6.4.3. Cas d'estudi

En aquest cas, el cas d'estudi no serà com els anteriors. En els models previs l'objectiu dels casos d'estudi era el de demostrar i corroborar el bon funcionament del model. Donat que el present model té la mateixa definició conceptual que el model 2, aquest enfocament no tindria sentit.

Per tal de comprovar el funcionament de la nova disposició matemàtica introduïda per les variables f, es proposa una comparació entre la resolució del mateix problema. El problema a resoldre és el proposat en el cas d'estudi 6.3.4.2. La comparació es realitza mirant el temps que triga el *solver* en trobar la solució òptima en cada plantejament.

El que cap esperar és que el model 3 sigui capaç de trobar la solució òptima més ràpidament, degut a la disminució del número de no linealitats presents al model.

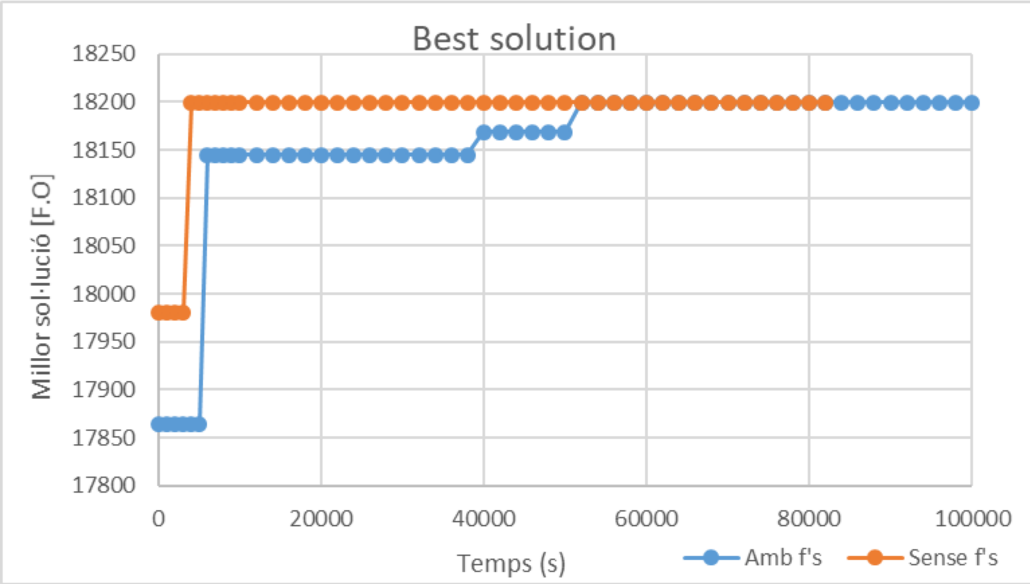
Per realitzar aquesta comparació es s'utilitza la mateixa màquina i el mateix *Solver*, per tal de minimitzar les variables que puguin afectar a la velocitat de càlcul del model, més enllà dels canvis que es volen provar. Les condicions experimentals per ambdós casos es detallen a la Taula 6.10.

Sistema Operatiu	Microsoft Windows 7 Professional
Processador	Intel(R) Core(TM) i7-2600 CPU @ 3.40GHz, 3701 Mhz
Processadors principals	4
Processadors lògics	8
Gams	Versió 23.8.2
Solver	*Convex Over and Under Envelopes for Nonlinear Estimation* (COUENNE)

Taula 6.10. Detalls experimentals de la comparativa entre models 2 i 3

6.4.4. Resultats

Una vegada fets córrer els dos problemes, ambdós arriben a la mateixa solució, com era d'esperar. En funció del temps d'execució, es representa el millor valor de la funció objectiu trobat pel *solver* COUENNE. Al Gràfic 6.9 es poden observar els resultats.



Gràfic 6.9. Comparació funció objectiu model 2 i 3

A simple vista es troba que les suposicions realitzades no han sigut complertes. Segons l'experiment, el Model 2 ha sigut més ràpid en trobar la solució, tot i tenir més no linealitats. Com a part de l'anàlisi dels resultats, s'intenta donar sentit a aquests resultats imprevistos.

En canviar l'enfocament del problema no només s'han perdut no linealitats, sinó que també s'han addicionat al model un gran número de variables, equacions i restriccions addicionals que faran més difícil la convergència del model. Més en profunditat:

- Variables: S'inclouen $f1_{kt}, f2_{kt}, f3_{kt}, f4_{kt}$. Concretament, en aquest cas d'estudi, $k = 2$ i $t = 15$. Això implica que s'han inclòs al model 120 variables.
- Restriccions: A 2 restriccions per variable introduïda, on cadascuna ha de ser executada per tot k i t, resulta en 240 restriccions incloses al model, com es demostra a l'equació

$$2restriccions * 4variables * 2clients * 15períodes =$$

$$2\,\frac{\boldsymbol{restriccions}}{\boldsymbol{variable\ client\ període}} * \boldsymbol{4\ variables} * \boldsymbol{2\ clients} * \boldsymbol{15\ períodes} = \boldsymbol{240\ restriccions} \quad \textbf{(Eq. 6.40)}$$

Per tant, el fet d'estalviar 4 no linealitats al model en la funció objectiu ha tingut el preu de que el model es veu obligat a gestionar 120 variables i 240 restriccions més que al model 2. A més, tot i les no linealitats estalviades, el model 3 en té d'altres derivades del càlcul de les concentracions i, per tant, segueix sent no lineal. Això implica que ha d'utilitzar igualment algoritmes de BARON enfocats a la resolució de problemes no lineals.

Es pot concloure, llavors, que l'eliminació de 4 no linealitats, quedant d'altres inherents al model, no simplifica suficientment el model com per compensar la incorporació de 120 variables i 240 restriccions extres. Aquesta conclusió porta a eliminar aquesta tècnica dels futurs models.

6.5. Model 4

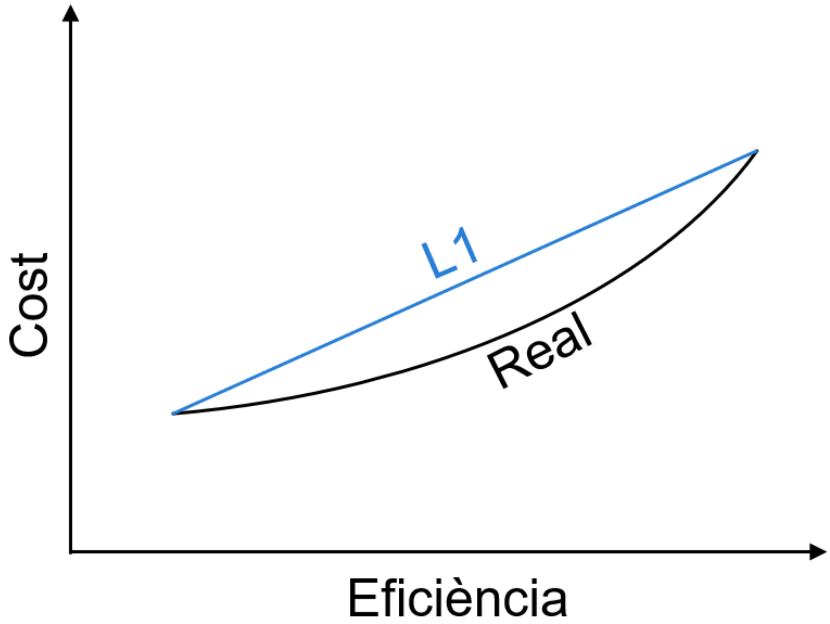
6.5.1. Plantejament del problema

El model 4 es presenta com una ampliació i millora dels models anteriors. És el resultat del primer contacte amb els responsables d'Aigües de Barcelona. Amb la informació obtinguda d'aquesta reunió és possible justificar algunes hipòtesis com per exemple el fet que el cabal d'aigua d'entrada i sortida de les línies de tractament és constant.

A partir de la reunió amb Aigües de Barcelona s'arriba a una nova manera de modelització de les línies de tractament. La realitat de les plantes de tractament d'aigües residuals, les línies poden treballar de diverses maneres o modes. Les *receptes* vinculades a cada línia d'aquest model 4 van ancorades a les línies i simbolitzen els modes en els que pot operar. Cada recepta ve caracteritzada els seus propis paràmetres d'operació (costos, eficiències, etc). A més, és possible fixar un límit superior i inferior per l'eficiència que pot tenir aquesta recepta. Això implica que una línia només pot operar una recepta en cada període. Aquesta condició haurà de ser eficientment representada en l'apartat restriccions 6.5.3.5. Per tal de ser més fidel a la realitat, el model calcula ara el cost de tractament no com a constant, sinó mitjançant una relació lineal amb l'eficiència, que serà una variable acotada per paràmetres superiors i inferiors.

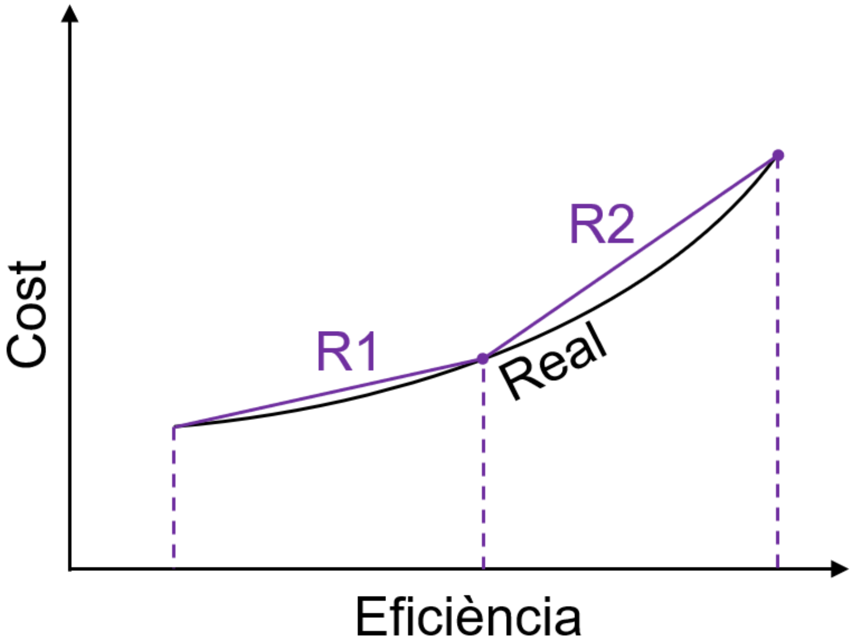
El concepte de recepta, a més, té una altra aplicació. També està concebut per poder representar la discretització d'un mateix mode d'operació. En aquesta línia, s'inclouen al model límits de concentració d'entrada de contaminants. Per entendre millor aquest concepte, una s'exposen una sèrie de gràfics conceptuals.

Degut a la complexitat dels tractaments d'aigües residuals, és més que factible afirmar que el cost associat no serà independent de l'eficiència amb què es treballi. Suposant una relació no lineal, conceptualment la del Gràfic 6.10:

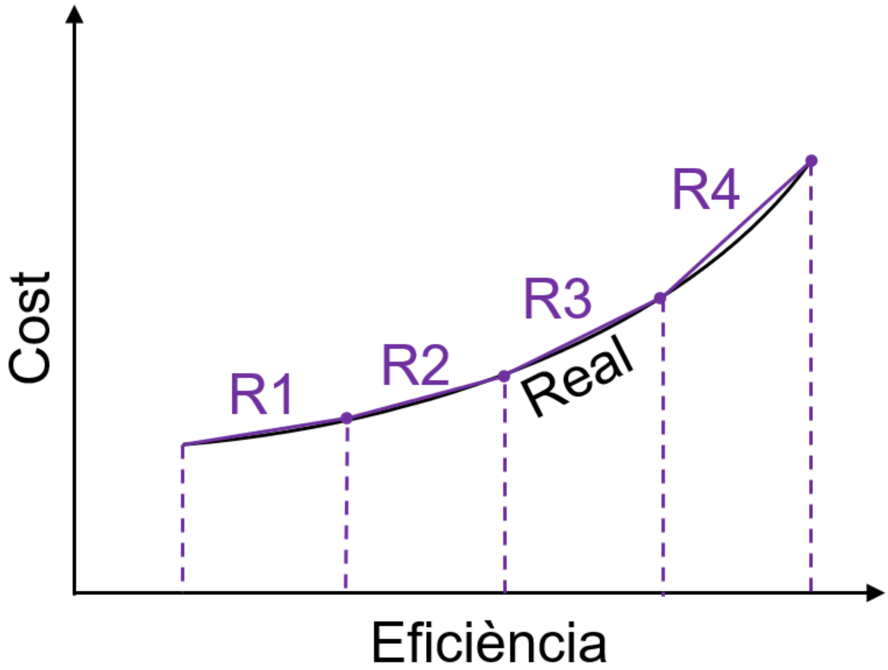


Gràfic 6.10. Aproximació a la corba real sense discretització

Es pot observar la diferència entre la corba real i l'aproximació que realitzaria el model anterior. Per tal de solucionar-ho, sense perdre la linealitat de l'aproximació, es poden prendre seccions de l'operació de la planta amb l'objectiu d'aproximar millor la corba real. A més, com es pot observar als gràfics Gràfic 6.11 i Gràfic 6.12, a més nombre de receptes, millor s'aproxima la realitat.



Gràfic 6.11. Aproximació a la corba real amb dues receptes



Gràfic 6.12. Aproximació a la corba real amb quatre receptes.

Per tant, les receptes són útils tant per representar modes d'operació com per desratitzar-los i fer-los així més precisos.

A més a més, el model 4 presenta una nova manera de modelitzar el benefici rebut pels clients. Per fer-ho s'utilitzen 3 nous paràmetres que el model interpretarà per representar la reacció d'un client segons el cabal d'aigua que la planta li enviï. Aquests tres paràmetres són definits per l'usuari del model i poden variar segons el client. L'objectiu és definir els tres punts claus per modelar aquesta resposta. Aquests tres punts són:

- El cost de ignorar al client i, per tant, no enviar cap unitat de cabal.
- El benefici net d'enviar al client exactament l'aigua que demanda.
- El cost associat a cada unitat de cabal que el cabal enviat excedeix la demanda del client.

6.5.2. Hipòtesis i limitacions

Cost depenent de la mitja d'eficiències.

Cap cabal extra a la demanda té retribució.

6.5.3. Formulació matemàtica

6.5.3.1. Sets

Degut a la introducció de les receptes vinculades a cada línia, és necessari incloure dos *sets* al model. Aquests *sets* són:

- Receptes: Modes d'operació de cada línia. R
- Connexió Línia-Recepta: És un set auxiliar necessari per conèixer quines receptes formen part de modes d'operació de quines línies. Aquest és un set especial, ja que no és independent. El *set* només connecta les línies amb les receptes. Es tracta d'una matriu que depèn dels altres dos *sets*. $iR(i,R)$

6.5.3.2. Paràmetres

En models anteriors, diversos paràmetres que definien l'operació de neteja d'aigua eren definits per cada línia. Donat que en el present model la neteja depèn de la recepta R, aquests paràmetres es veuran afectats d'aquesta mateixa manera. A més, s'introdueixen alguns paràmetres per poder definir amb més precisió la planta:

- InQ_t: Cabal d'entrada a la planta.
- InC_{jt}: Concentració contaminant j a l'entrada.
- Cjs_{jR}: Concentració contaminant j a la sortida de la recepta R.
- $CostA_{Rt}$: Pendent de la funció cost per la recepta R.
- $CostB_{Rt}$: Ordenada a l'origen de la funció cost per la recepta R.
- $MaxQ_{Rt}$: Màxim cabal que pot tractar la línia i.
- $MinQ_{Rt}$: Mínim cabal que pot tractar la línia i.
- $MaxCin_{jR}$: Màxima concentració del contaminant j a l'entrada de la recepta R.
- $MinCin_{jR}$: Mínima concentració del contaminant j a l'entrada de la recepta R.
- $MaxCout_{jR}$: Mínima concentració del contaminant j a la sortida de la recepta R.
- $MaxEf_{jR}$: Màxima eficiència assolible per la recepta R eliminant j.
- $MinEf_{jR}$: Mínima eficiència assolible per la recepta R eliminant j.
- $MaxC_{jk}$: Exigències de qualitat del client k pel contaminant j.
- d_{kt}: Demanda del client k el període t.
- $Psup_{kt}$: Benefici que suposa el client k per unitat de cabal per sobre la demanda.
- $Binf_{kt}$: Benefici que suposa el client k per unitat de cabal per sota la demanda.
- $Pinf_{kt}$: Penalització que suposa el client k per unitat de cabal que falta per satisfer la demanda.

6.5.3.3. Variables

Amb les variables passa el mateix que passava amb els paràmetres. A continuació, la llista completa.

- a_{kt}: Variable binària auxiliar que indica si el client k està rebent més cabal que el que defineix la seva demanda D_{kt} ($a_{kt} = 0$) o si n'està rebent menys ($a_{kt} = 1$) en el període t.
- b_{Rt}: Variable binària auxiliar que indica si la recepta R està en ús ($b_{Rt} = 1$) o si no ho està ($b_{Rt} = 0$).
- X_{it}: Tant per 1 d'aigua d'entrada que va a cada línia i.
- Qi_{it}: Cabal de sortida de cada línia i.
- QR_{Rt}: Cabal de sortida de cada recepta R.
- CR_{Rjt}: Concentració de cada contaminant j a la sortida de la recepta R.
- Ci_{ijt}: Concentració de cada contaminant j a la línia i.
- Ef_{jRt}: Eficiència de la recepta R eliminant el contaminant j.

En aquest model, l'eficiència passa de ser un paràmetre a formar part de les variables. La manera d'operar amb aquesta variable serà que a cada recepta es té un rang d'eficiència determinat pels paràmetres ja definits $MaxEf_{jR}$ i $MinEf_{jR}$. Segons el valor que el model prengui com eficiència, es tindrà un cost associat per unitat de cabal. Aquest cost associat es calcula linealment mitjançant els paràmetres $CostA_{Rt}$ i $CostB_{Rt}$.

- Y_{ikt}: Tant per 1 de distribució entre línies i clients.
- Ck_{kjt}: Concentració del contaminant j en el corrent pel client k.
- Qk_{kt}: Cabal que arriba al client k.

6.5.3.4. Equacions

Com en els models anteriors:

- *(Eq. 6.41)*: Càlcul del cabal de sortida de la línia i en el període t. Equació bàsica pel repartiment de l'aigua entre les línies de tractament mitjançant la variable X_{it}.

$$\boldsymbol{Qi_{it} = X_{it} \cdot InQ_t \quad \forall\, i, t} \qquad \textbf{\textit{(Eq. 6.41)}}$$

- *(Eq. 6.42)* i *(Eq. 6.17)*: Càlcul del cabal del corrent que va a cada client k pel període t. S'utilitza la variable Y_{ikt} per sumar l'aigua que arriba al client k desde cada línia i.

$$\boldsymbol{Qk_{kt} = \sum_{i} Y_{ikt} \cdot Qi_{it} \quad \forall\, k, t} \qquad \textbf{\textit{(Eq. 6.42)}}$$

- *(Eq. 6.43)*: Càlcul de la concentració del corrent que va a cada client k en el període t.

$$\boldsymbol{Ck_{kjt} = \frac{\sum_i Ci_{ijt} \cdot Qi_{it} \cdot Y_{ikt}}{\sum_i Y_{ikt} \cdot Qi_{it}} \quad \forall\, j, t} \qquad \textbf{(Eq. 6.43)}$$

A més, en aquest model s'inclouen les equacions pel càlcul intern de les línies, en concret per les receptes:

- *(Eq. 6.44)***:** Càlcul del cabal que circula per la recepta R, només apte per aquelles que estiguin actives ($b_{Rt} = 1$).

$$\boldsymbol{QR_{Rt} = b_{Rt} \cdot Qi_{it} \quad \forall\, i, R, t} \qquad \textbf{(Eq. 6.44)}$$

- *(Eq. 6.45)***:** Càlcul de les concentracions internes per recepta, també només per aquelles que estiguin actives ($b_{Rt} = 1$). En cas de no estar activa, CR_{Rjt} prendrà un valor nul en tot cas.

$$\boldsymbol{CR_{Rjt} = b_{Rt} \cdot \left(1 - Ef_{jRt}\right) \cdot InC_{jt} \quad \forall\, i, j, R, t} \qquad \textbf{(Eq. 6.45)}$$

- *(Eq. 6.46)*: La concentració de les línies es calcula a partir de la trobada per cada recepta mitjançant l'equació *(Eq. 6.45)*. Degut a que només les receptes actives tenen una concentració CR_{Rjt} no nul·la, la suma de totes les receptes que pertanyen a la línia i (per això es multiplica per iR_{iR} donaran efectivament la concentració ci_{ijt}.

$$\boldsymbol{Ci_{ijt} = \sum_R \left(CR_{Rjt} \cdot iR_{iR}\right) \quad \forall\, i, j, t} \qquad \textbf{(Eq. 6.46)}$$

6.5.3.5. Restriccions

- *(Eq. 6.47)*: La suma de X_i ha de ser 1 per cada línia i i cada període t. Tota l'aigua que arriba a la planta (InQ_t) es reparteix entre les línies. Per tant la suma dels tants per 1 de reparticions ha de sumar 1.

$$\boldsymbol{\sum_i X_{it} = 1 \quad \forall\, t} \qquad \textbf{(Eq. 6.47)}$$

- *(Eq. 6.48)*: La suma de Y_{ikt} respecte cada línia i ha de ser 1, ja que la línia ha d'enviar, entre tots els clients, la totalitat de l'aigua que ha tractat.

$$\sum_{k} Y_{ikt} = 1 \quad \forall\, i, t$$ ***(Eq. 6.48)***

- *(Eq. 6.49)*: L'aigua que arriba al client k (Qk_k) ha de complir les exigències de qualitat que se li imposen. Per tant les concentracions de contaminants han de ser menors als límits dels clients

$$\boldsymbol{Ck_{kjt} \leq MaxC_{kj}\ \forall\, i, t}$$ ***(Eq. 6.49)***

- *(Eq. 6.50)* i *(Eq. 6.51)*: Big M que assegura que a_{kt} és 1 quan la demanda no és satisfeta i que val 0 quan si que ho és.

$$\boldsymbol{(D_{kt} - Qk_{kt}) \leq M \cdot a_{kt}}$$ ***(Eq. 6.50)***

$$\boldsymbol{(Qk_{kt} - D_{kt}) \leq M \cdot (1 - a_{kt})}$$ ***(Eq. 6.51)***

A part d'aquestes restriccions, ja presents als models anteriors, altres restriccions lògiques s'han d'incloure al model per que sigui representatiu de la realitat:

- *(Eq. 6.52)*: Només una recepta pot trobar-se activada per cada línia. A més, aquesta restricció assegura que una recepta es troba activa per cada línia.

$$\boldsymbol{1 = \sum_{R} (b_{Rt} \cdot iR_{iR}) \quad \forall\, i, t}$$ ***(Eq. 6.52)***

- *(Eq. 6.53)* i *(Eq. 6.54)*: En aquest model, els màxims de cabal a tractar no depenen de cada línia sinó de cada recepta. Així, el model es capaç de representar una mateixa línia amb dues capacitats diferents, segons el mode d'operació. Com equacions anteriors, només serà activa quan la recepta estigui en ús ($b_{Rt} = 1$).

$$\boldsymbol{MaxQ_{Rt} \geq QR_{Rt} \cdot b_{Rt} \quad \forall\, R, t}$$ ***(Eq. 6.53)***

$$\boldsymbol{MinQ_{Rt} \cdot b_{Rt} \leq QR_{Rt} \quad \forall\, R, t}$$ ***(Eq. 6.54)***

- *(Eq. 6.55)* i *(Eq. 6.56)*: Amb l'objectiu d'utilitzar el set receptes també com a mètode de discretització, les següents restriccions acoten la regió factible de treball de cadascuna en termes de concentració de contaminants d'entrada.

$$\boldsymbol{MaxCin_{jR} \geq InC_{jt} \cdot b_{Rt} \quad \forall\, j, R, t}$$ ***(Eq. 6.55)***

$$\boldsymbol{MinCin_{jR} \cdot b_{Rt} \leq InC_{jt} \quad \forall\, j, R, t} \tag{Eq. 6.56}$$

- *(Eq. 6.57)* i *(Eq. 6.58)*: Tal i com en les dues restriccions anteriors, aquestes tracten d'acotar el rang d'operació de cada recepta. En aquest cas, la variable acotada és l'eficiència del tractament.

$$\boldsymbol{MaxEf_{jR} \geq Ef_{jRt} \cdot b_{Rt} \quad \forall\, j, R, t} \tag{Eq. 6.57}$$

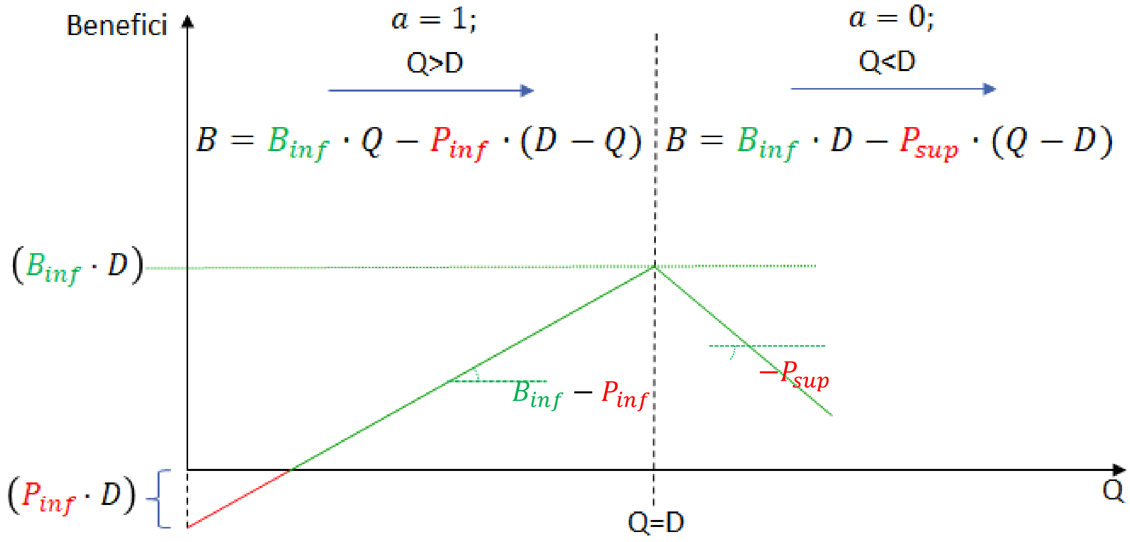
$$\boldsymbol{MinEf_{jR} \cdot b_{Rt} \leq Ef_{jRt} \quad \forall\, j, R, t} \tag{Eq. 6.58}$$

6.5.3.6. Funció objectiu

Com en els models anteriors, la funció objectiu es pot separar en diverses seccions. Una és la que fa referència al benefici (o cost) derivat del tracte amb els clients demandants d'aigua. Aquesta part es presenta innovadora respecte els altres models:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{FO_{benefici}} = \sum_{t} \Bigg\{ \sum_{k} \Big\{ \boldsymbol{a_{kt}} \cdot \Big[\boldsymbol{B_{inf_{kt}}} \cdot \boldsymbol{Qk_{kt}} - \boldsymbol{P_{inf_{kt}}} \cdot (\boldsymbol{D_{kt}} - \boldsymbol{Qk_{kt}}) \Big] + (\boldsymbol{1} - \boldsymbol{a_{kt}}) \\ \cdot \Big[\boldsymbol{B_{inf_{kt}}} \cdot \boldsymbol{D_{kt}} - \boldsymbol{P_{sup_{kt}}} \cdot (\boldsymbol{Qk_{kt}} - \boldsymbol{D_{kt}}) \Big] \Big\} \Bigg\} \end{aligned} \tag{Eq. 6.59}$$

Aquesta representació dona moltes possibilitats alhora de representar clients molt diversos. És fàcilment comprensible gràficament:



Gràfic 6.13 Modelització del benefici aportat pels clients Model 4

A l'eix de les abscisses es troba el cabal enviat al client, destacant la vertical discontinua que indica el cabal demandat. A les ordenades, el benefici o cost retornat pel client. Com es pot observar, la manipulació dels paràmetres B_{inf}, P_{inf} i P_{sup} dona la llibertat suficient per prescindir de la categorització dels clients en tipus de clients pel paràmetre p de models anteriors.

Pel que fa als costos de tractament de l'aigua, aquest model també presenta novetats alhora de calcular. I és que, ara, l'eficiència és una variable acotada del model. Per que el model pugui "decidir" el seu valor apropiadament, ha de tenir repercussió a la funció objectiu. Com és ja s'ha comentat (6.5.1), l'eficiència apareix al càlcul del cost de les línies de tractament. A més eficiència, més cost, a raó del paràmetre $CostA_{Rt}$. S'inclou també $CostB_{Rt}$ com ordenada a l'origen de la funció per una millor representació de la recta.

Nogensmenys, hi ha una eficiència per cada contaminant modelat. Amb l'objectiu de simplificar el càlcul i no tenir un cost per cada contaminat eliminat, el paràmetre $CostA_{Rt}$ es multiplica per la mitjana de les eficiències. Així, resulta la funció de cost associada a l'EDAR del model 4:

$$FO_{Cost} = \sum_{t} \left\{ \sum_{R} \{ CostA_{Rt} \cdot \overline{Ef_{JRt}} + CostB_{Rt} \} \cdot QR_{Rt} \right\} \quad \textbf{(Eq. 6.60)}$$

S'uneixen ambdues funcions en una sola. El resultat és la funció objectiu a maximitzar en el model 4.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{FO} = \sum_{t} \Bigg\{ \sum_{k} \Big\{ \boldsymbol{a_{kt}} \cdot \Big[\boldsymbol{B_{inf_{kt}}} \cdot \boldsymbol{Qk_{kt}} - \boldsymbol{P_{inf_{kt}}} \cdot (\boldsymbol{D_{kt}} - \boldsymbol{Qk_{kt}}) \Big] + (\mathbf{1} - \boldsymbol{a_{kt}}) \\ \cdot \Big[\boldsymbol{B_{inf_{kt}}} \cdot \boldsymbol{D_{kt}} - \boldsymbol{P_{sup_{kt}}} \cdot (\boldsymbol{Qk_{kt}} - \boldsymbol{D_{kt}}) \Big] \Big\} \\ - \sum_{R} \Big\{ \boldsymbol{CostA_{Rt}} \cdot \overline{\boldsymbol{Ef_{JRt}}} + \boldsymbol{CostB_{Rt}} \Big\} \cdot \boldsymbol{QR_{Rt}} \Bigg\} \end{aligned} \quad \textbf{(Eq. 6.61)}$$

6.5.4. Cas d'estudi

Degut a que en el model 2 i 3 ja s'ha demostrat que el set t està ben definit i que funciona, en aquest cas d'estudi només se n'utilitzarà un. Per tant, s'enfoca a comprovar la definició de les receptes. En aquest cas se li dona nom a les línies de tractament. Aquestes estan basades en les línies de tractament de la EDAR Gavà-Viladecans, d'Aigües de Barcelona. Es disposa de 3 línies:

- MBR (*Membrane Bioreactor*): Línia de l'EDAR amb tecnologia de Bioreactor de Membrana, amb una capacitat de $25000\ \frac{u.c.}{període}$ i una eficiència definida a la Taula 6.11 segons el contaminant.
- $IFAS$ (*Integrated Fixed-Film Activated Sludge*): Línia també presesent a l'EDAR, amb una capacitat de $25000\ \frac{u.c.}{període}$ i una eficiència definida a la Taula 6.11 segons el contaminant.
- SF (Sant Feliu): Tot i no ser una línia de l'EDAR de Gavà-Viladecans, aquesta altra EDAR veïna se suposa com una línia a la que es pot recórrer si hi ha excés d'entrada. Disposa de $60000 \frac{u.c.}{període}$ de capacitat, amb eficiències d'eliminació de contaminants iguals a les de la $IFAS.$

Cada línia pot treballar amb dues receptes, representant l'operació amb tractament terciari de nutrients (eliminació de nitrogen N i fòsfor P) i sense aquest tractament. La disposició de les línies és la que es pot observar a la Figura 6.6.

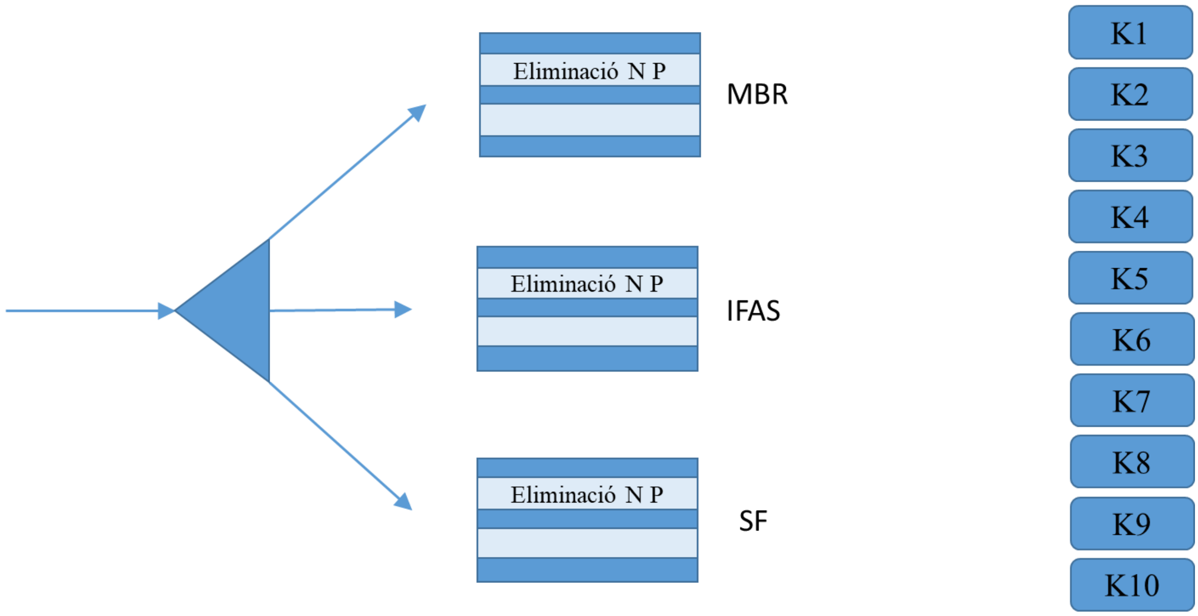


Figura 6.6 Disposició Línies-Clients cas d'estudi Model 4

Els contaminants modelats en aquest cas d'estudi ja no són genèrics ($C1, C2, C3$), sinó que reben noms i valors aproximants a aquells presents a l'EDAR Gavà-Viladecans. Aquests són els sòlids en suspensió (SS), la demanda bioquímica d'oxigen (DBO), la demanda química d'oxigen (DQO), nitrogen (N) i fòsfor (P). Les màximes eficiències de les receptes de cada línia eliminant aquests contaminants es detallen a continuació:

Taula 6.11 Màxima eficiència de cada recepta cas d'estudi Model 4

$MaxEf_{jR}$	MBR		IFAS		SF	
	R11	R12	R21	R22	R31	R32
SS	0,997	0,997	0,9	0,9	0,9	0,9
DBO	0,986	0,986	0,93	0,93	0,93	0,93
DQO	0,95	0,95	0,64	0,64	0,64	0,64
N	0	0,857	0	0,857	0	0,857
P	0	0,889	0	0,889	0	0,889

Pel que fa als mínims, es fixen a $MinEf_{jR} = MaxEf_{jR} - 0.01$ per simplificar el cas, excepte pels casos en els que $MaxEf_{jR} = 0$, en quin cas $MinEf_{jR} = 0$ igualment.

El cost d'utilitzar les línies és:

Taula 6.12 Caracterització del cost de les receptes, Cas d'estudi Model 4

	R11	R12	R21	R22	R31	R32
CostA	0	0	0	0	0	0

CostB	0,541	0,595	0,298	0,3278	0,298	0,3278

Com es pot observar a la Figura 6.6, es treballa amb deu clients potencials. Els seus paràmetres són els següents:

Taula 6.13 Caracterització de la demanda d'aigua dels clients, Cas d'estudi Model 4

MaxC	K1	K2	K3	K4	K5	K6	K7	K8	K9	K10
SS	2	15,45	15,45	0,9	0,9	30	30	3,6	0,81	31
DBO	10	12,6	12,6	4,2	4,2	21	21	16,8	3,78	22
DQO	60	123	123	30	30	216	216	120	27	217
N	30	80	45,72	80	11,44	80	11,44	45,76	12	80
P	3	10	5,555	10	1,11	10	1,11	4,44	2	20
D	K1	K2	K3	K4	K5	K6	K7	K8	K9	K10
t1	20000	5000	2000	500	1500	3000	1000	2500	4000	100000

Per acabar de definir el comportament dels clients cal també conèixer els paràmetres que defineixen el seu benefici o cost associat:

Taula 6.14 Caracterització del comportament dels clients, Cas d'estudi Model 4

	K1	K2	K3	K4	K5	K6	K7	K8	K9	K10
Binf	0	0,6475	0,6657	0,8065	0,8429	0,4884	0,5249	0,7952	0,8436	0
Pinf	0,8211	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Psup	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

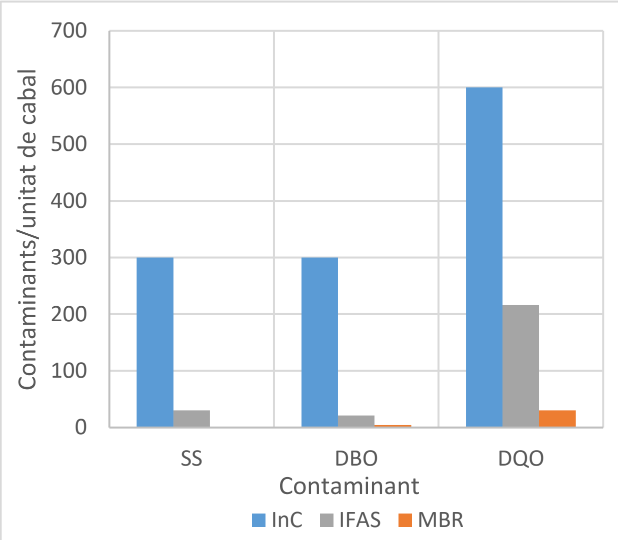
Aquesta caracterització es realitza regles de tres amb l'exigència de cada client i els preus bàsics d'Aigües de Barcelona («Preus i tarifes - Aigües de Barcelona»). Els valors, tot i no ser fiables per un estudi econòmic exhaustiu, poden donar una idea del rendiment econòmic de la planta.

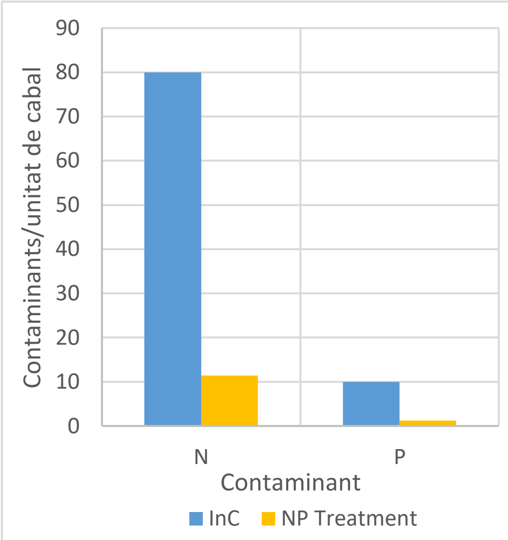
Pel que fa a la caracterització de l'entrada, l'EDAR ha de tractar $55000\ \frac{u.c.}{periode}$ amb les concentracions dels contaminants mostrades a la Taula 6.15.

Taula 6.15 Caracterització dels contaminants a l'entrada, Cas d'estudi Model 4

InC_{jt}	SS	DBO	DQO	N	P
t1	300	300	600	80	10

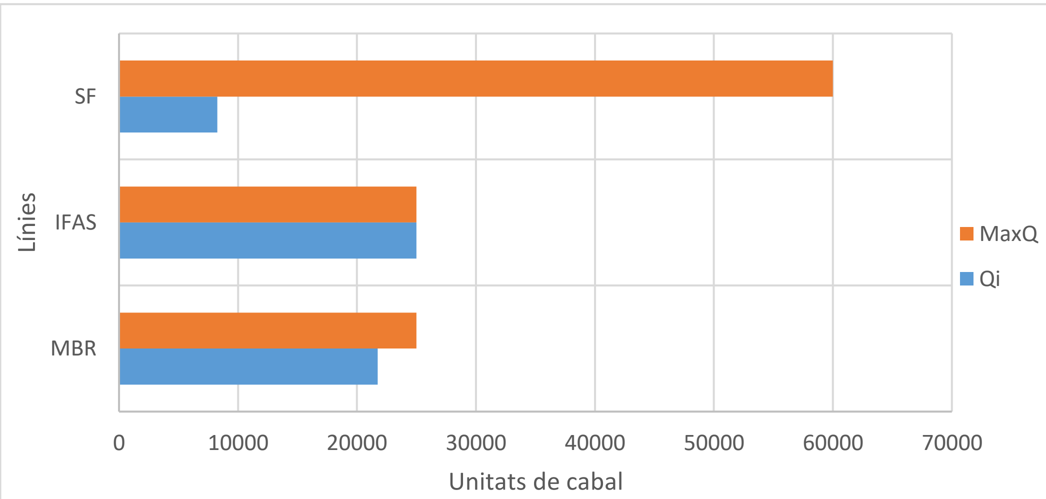
6.5.5. Resultat





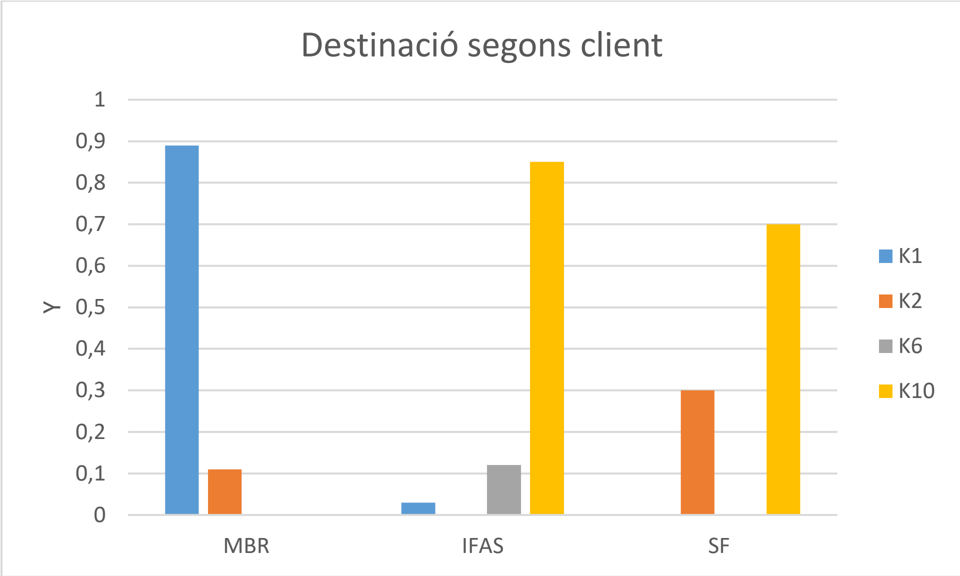
Gràfic 6.14 Representació de la contaminació d'entrada i de l'assolible pels tractaments disponibles, Cas d'estudi Model 4

Com es pot observar al gràfic anterior, la línia que millor eficiència pot oferir és la MBR. Aquesta serà la línia que s'utilitzarà majoritàriament, previsiblement, per satisfer als clients més exigents. La línia IFAS ofereix la mateixa eficiència que la línia SF, per la qual cosa només es representa la IFAS.



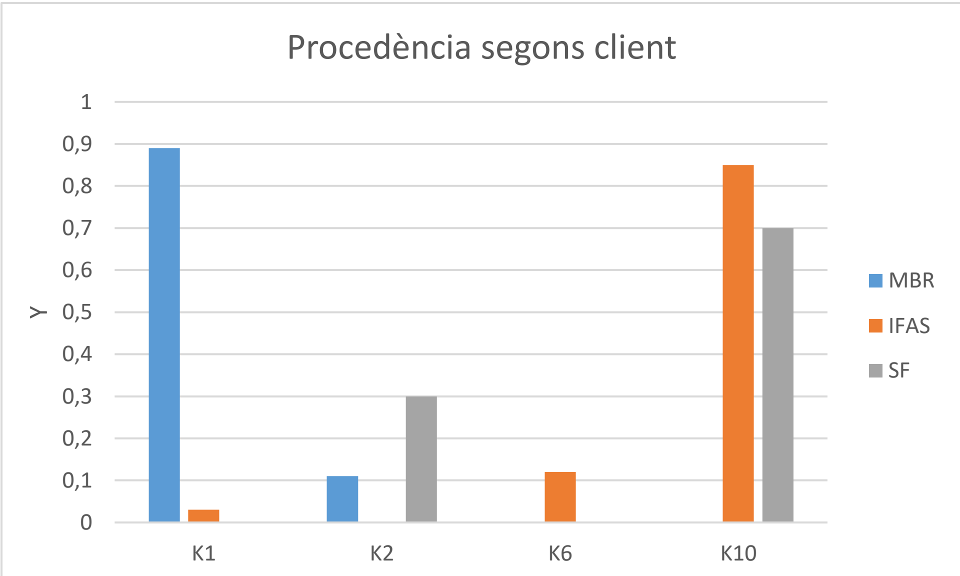
Gràfic 6.15 Cabal enviat a cada línia respecte la capacitat d'aquesta, Cas d'estudi Model 4

Passant als resultats, es pot veure com la línia IFAS està treballant a màxim cabal, mentre que MBR, la línia més eficient, no ho està. Cal dir que la línia MBR és l'única que està treballant amb el mode d'operació d'eliminació de nutrients N i P.



Gràfic 6.16 Client destinatari de l'aigua segons la línia d'origen, Cas d'estudi Model 4

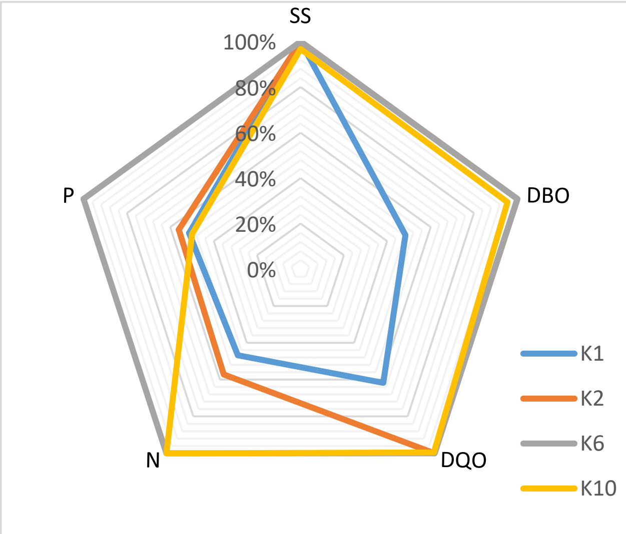
Al Gràfic 6.16 s'observa com els únics clients satisfets són K1, K2, K6 i K10. Al gràfic es veu com l'MBR envia aigua a K1 i K2, els dos clients més exigents que es satisfan a la solució.



Gràfic 6.17 Destí de l'aigua tractada segons la línia d'origen, Cas d'estudi Model 4

Al Gràfic 6.17 es realitza el mateix anàlisi però des de el punt de vista dels clients. L'aigua de major qualitat, tractada per MBR (l'única amb eliminació de nutrients), és enviada majoritàriament al client K1, que és, dels satisfets, el client amb més exigència de contaminants.

Al següent gràfic es mostra el percentatge de contaminants presents al cabal enviat als clients satisfets Ck, respecte el màxim acceptable $MaxCk$.



Gràfic 6.18 Concentració relativa de contaminants segons client, Cas d'estudi Model 4

És fàcil de veure que tots els contaminants són eliminats dins els límits fixats per cada client. Com a exemple, en el cas del client $K1$, es pot observar com el contaminant SS actua com a límit de qualitat. Si no fos per aquest contaminant, l'aigua que rep $K1$ podria tenir més proporció de la línia IFAS, resultant així un client més barat de satisfer. No obstant això, el que passa en realitat es que el component SS actua com a contaminant limitant per aquest client.

El període modelat reporta una funció objectiu maximitzada fins al valor de $-17852{,}89$. Tot i que els paràmetres poden tenir unitats tals que el resultat d'aquesta funció objectiu sigui representat en €, no es pot confiar en aquests valor. No obstant això, el que sí que es pot realitzar és una comparació.

Prenent com a base el cas de l'EDAR Gavà-Viladecans (2.4), on l'operació real actual correspondria a enviar el 50% a cada línia (MBR i IFAS) i repartir l'aigua entre dos clients. L'aigua de la MBR va a parar a l'estany de la murtra, per mantenir el seu nivell, i l'aigua tractada per la línia IFAS va a parar directament al mar, sense reportar benefici. Aquest cas d'estudi s'ha realitzat des d'un principi per comparar l'operació real amb l'optimització, basant els paràmetres definitoris de l'estació (caracterització de l'entrada, eficiències, concentracions de sortida, ...)a partir d'algunes dades facilitades informalment per Aigües de Barcelona.

Amb el recurs de fixar variables a GAMS, es fixen els cabals al $50/50$ i s'utilitzen els clients *K1* i *K10* per simular el comportament de la murtra i el mar, respectivament. En realitzar "l'optimització", el resultat proporcionat pel model retorna una funció objectiu $5000\ \frac{u.m.}{període}$ pitjor que l'optimitzada lliurement.

6.6. Model 5

6.6.1. Plantejament del problema

El cinquè i últim model. Es tracta d'una ampliació conceptual a partir del model 4. L'ampliació se centra precisament en les possibles expansions que podrien presentar les línies al llarg del temps. La idea és obrir la porta a aquestes expansions, amb certes condicions i costos associats, tal i com es fa a la bibliografia. (Somoza et al. 2016)

Per període de temps t s'imposen uns límits superiors i inferiors a l'increment de capacitat que pot comportar una certa expansió. Aquests valors podran variar per a cada línia. El model també dona la possibilitat de fixar un número màxim d'expansions que pot realitzar una línia en l'horitzó temporal en què s'operi.

6.6.2. Hipòtesis i limitacions

Per poder aplicar aquestes expansions amb rigor, no té sentit que es treballi sobre les receptes. Evidentment, degut a que una expansió s'efectua a una línia, afectarà a totes les receptes de la mateixa manera. Tot i que dues receptes poden tenir diferents capacitats, en aquest model s'ha de tenir en compte la hipòtesi que afirma que això no és així. Llavors, en aquest model es torna de $MaxQ_{Rt}$ del model 4 a $MaxQ_{it}$ de models anteriors.

Passant a les expansions pròpiament, hi ha diversos aspectes a tenir en compte. Primerament, el model suposa que les expansions, tot i tenir límits de quantitat i número, es poden fer a qualsevol període, indiferentment. Això implica que una línia pot realitzar les seves expansions, per exemple, successivament, cosa que a la realitat seria difícil.

D'altra banda, una línia pot efectuar una expansió de un període a un altre sense necessitat de cap tipus d'aturada. A la realitat seria necessària una parada de uns determinats períodes per tal d'adaptar la línia a la nova manera d'operar, una vegada efectuada l'expansió.

Aquesta última hipòtesi té a veure amb l'horitzó temporal. I és que, fins aquest model, l'optimització que s'estava realitzant era a curt termini, essent els períodes hores, dies o, com a molt, setmanes. Arrel de la incorporació de les expansions, cal replantejar aquest fet i trobar un acord entre el curt i llarg termini. En aquest model, l'acord vira cap a romandre al curt termini, per poder referenciar-se amb els models anteriors.

Si el model canviés a modelar períodes mensuals, trimestrals o fins i tot anuals, les hipòtesis anteriorment explicades serien més fàcilment justificables, ja que el temps de parada seria negligible envers els temps de parada.

6.6.3. Formulació matemàtica:

6.6.3.1. Sets

El model 5 treballa amb els mateixos sets que el model 4.

6.6.3.2. Paràmetres

Degut a que el model 6 presenta alguns canvis en paràmetres ja introduïts, es tornen a detallar. Les diferències i novetats es marquen en negreta:

- InQ_t: Cabal d'entrada a la planta.
- InC_{jt}: Concentració contaminant j a l'entrada.
- Cjs_{jR}: Concentració contaminant j a la sortida de la recepta R.
- $CostA_{Rt}$: Pendent de la funció cost per la recepta R.
- $CostB_{Rt}$: Ordenada a l'origen de la funció cost per la recepta R.
- **$\boldsymbol{MaxQ0_{it}}$: Màxim cabal que pot tractar la línia $\boldsymbol{i}$ en període inicial.**
- **$\boldsymbol{MinQ_{it}}$: Mínim cabal que pot tractar la línia $\boldsymbol{i}$.**
- $MaxCin_{jR}$: Màxima concentració del contaminant j a l'entrada de la recepta R.
- $MinCin_{jR}$: Mínima concentració del contaminant j a l'entrada de la recepta R.
- $MaxCout_{jR}$: Mínima concentració del contaminant j a la sortida de la recepta R.
- $MaxEf_{jR}$: Màxima eficiència assolible per la recepta R eliminant j.
- $MinEf_{jR}$: Mínima eficiència assolible per la recepta R eliminant j.
- $MaxC_{jk}$: Exigències de qualitat del client k pel contaminant j.
- d_{kt}: Demanda del client k el període t.
- $Psup_{kt}$: Benefici que suposa el client k per unitat de cabal per sobre la demanda.
- $Binf_{kt}$: Benefici que suposa el client k per unitat de cabal per sota la demanda.
- $Pinf_{kt}$: Penalització que suposa el client k per unitat de cabal que falta per satisfer la demanda.
- **$\boldsymbol{MaxEC_i}$: Màxima expansió que pot assolir la línia $\boldsymbol{i}$ en un període $\boldsymbol{t}$**
- **$\boldsymbol{MinEC_i}$: Màxima expansió que pot assolir la línia $\boldsymbol{i}$ (en cas d'experimentar-la) en un període $\boldsymbol{t}$.**
- **$\boldsymbol{Alpha_i}$: Paràmetre alfa pel càlcul del cost associat a les expansions..**
- **$\boldsymbol{Beta_i}$: Paràmetre beta pel càlcul del cost associat a les expansions.**

6.6.3.3. Variables

Les variables introduïdes són:

- Exp_{it}: Variable binària que indica si es produeix expansió ($Exp_{it} = 1$) o no ($Exp_{it} = 0$) en la línia i en el període t.
- $MaxQ_{it}$: Màxima capacitat de la línia i en el període t.

La capacitat passa a ser una variable ja que es calcula a partir de les expansions que es produeixin a les línies.

- EC_{it}: Expansió de la capacitat de la línia i en el període t.

6.6.3.4. Equacions

A part de les equacions del model 4, excepte les referents al màxim i mínim de cabal:

- *(Eq. 6.62)(Eq. 6.43)*: Càlcul de la màxima capacitat de la línia i pel primer període, a partir del paràmetre de màxim cabal inicial ($MaxQ0_i$).

$$\boldsymbol{MaxQ_{it} = MaxQ0_i + EC_{it} \cdot Exp_{it} \qquad \forall\, i, t = t1} \qquad \textbf{\textit{(Eq. 6.62)}}$$

- *(Eq. 6.63)*: Càlcul de la màxima capacitat de la línia i per la resta de períodes. En aquest cas, a partir de la màxima capacitat del període anterior ($t-1$).

$$\boldsymbol{MaxQ_{it} = MaxQ_{i(t-1)} + EC_{it} \cdot Exp_{it} \qquad \forall\, i, t > t1} \qquad \textbf{\textit{(Eq. 6.63)}}$$

6.6.3.5. Restriccions

Per que les expansions funcionin com es desitja, les següents restriccions són necessàries, a part de les del model 4:

- *(Eq. 6.64)*: La variable binària Exp_{it} condiciona el valor d'EC_{it} per assegurar que $Exp_{it} = 1$ si hi ha expansió ($EC_{it} > 0$) i que $Exp_{it} = 0$ si no n'hi ha.

$$\boldsymbol{BigM \cdot Exp_{it} \geq EC_{it} \qquad \forall i, t} \qquad \textbf{\textit{(Eq. 6.64)}}$$

- *(Eq. 6.65)*: La quantitat d'expansió no pot ser més gran que el paràmetre $MaxEC_i$, que en fixa el límit superior.

$$\boldsymbol{MaxEC_i \geq EC_{it} \quad \forall i, t}$$ ***(Eq. 6.65)***

- *(Eq. 6.66)*: Com a l'equació anterior, la quantitat d'expansió no pot ser més petita que el paràmetre $MaxEC_i$, que en fixa el límit inferior.

$$\boldsymbol{MinEC_i \leq EC_{it} \quad \forall i, t}$$ ***(Eq. 6.66)***

- *(Eq. 6.67)*: El número d'expansions a l'horitzó temporal total no pot superar un paràmetre introduït per cada línia.

$$\boldsymbol{\sum_t Exp_{it} \leq MaxExp_i \quad \forall i}$$ ***(Eq. 6.67)***

6.6.3.6. Funció objectiu

A part de la funció objectiu del model 4, cal introduir el cost associat a la realització de les expansions. Aquest es construeix amb els dos paràmetres de cost introduïts a 6.6.3.2:

$$\boldsymbol{FO_{cost_{expansions}} = \sum_t \left\{ \sum_i (Alpha_i \cdot EC_{it} + Beta_i \cdot Exp_{it}) \right\}}$$ ***(Eq. 6.68)***

La funció objectiu total resultant és la mostrada a l'equació *(Eq. 6.69)*:

$$\boldsymbol{FO_{benefici} = \sum_t \left\{ \sum_k \left\{ a_{kt} \cdot \left[B_{inf_{kt}} \cdot Qk_{kt} - P_{inf_{kt}} \cdot (D_{kt} - Qk_{kt}) \right] + (1 - a_{kt}) \right. \right.}$$
$$\boldsymbol{\left. \cdot \left[B_{inf_{kt}} \cdot D_{kt} - P_{sup_{kt}} \cdot (Qk_{kt} - D_{kt}) \right] \right\} - \sum_R \left\{ CostA_{Rt} \cdot \overline{Ef_{jRt}} + CostB_{Rt} \right\}}$$
$$\boldsymbol{\left. \cdot QR_{Rt} - \sum_i (Alpha_i \cdot EC_{it} + Beta_i \cdot Exp_{it}) \right\}}$$ ***(Eq. 6.69)***

6.6.4. Cas d'estudi

Per provar que les expansions s'han modelat correctament , es proposa un cas d'estudi. Aquest és molt senzill pel que fa a tots els altres paràmetres, per centrar-se en les expansions. L'entrada, el caudal de la qual varia amb el temps, només ve parametritzada per un contaminant genèric: *C1*. L'aigua es neteja en dues línies, *L1* i *L2*, on *L1* es molt més eficient que *L2* (ambdues tenen una única recepta). Els paràmetres concrets es poden trobar a la Taula 6.16:

Taula 6.16 Caracterització entrada Cas d'estudi Model 5

	t1	t2	t3	t4	t5
InQ	5000	10000	10000	5000	5000
InC: C1	100	100	100	100	100
CostB: R1	1	1	1	1	1
CostB: R2	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5

Pel que fa a les expansions, els paràmetres definitoris es mostren a Taula 6.17.

Taula 6.17 Caracterització Línies i expansions Cas d'estudi Model 5

	$MaxQ0_i$	$MaxEC_i$	$MinEC_i$	$Alpha_i$	$Beta_i$
L1	5000	1000	50	50	500
L2	50000	1000	50	50	500
	$MaxExp_i$	$MaxEf_{R=i}$	$MinEf_{R=i}$	$CostB_R$	
L1	10	0,9	0,8	1	
L2	10	0,5	0,4	0,5	

Aquest cas d'estudi disposa de dos clients: *K1* i *K10*, on *K1* és més exigent i, conseqüentment, té un benefici associat major que el client *K10*. La demanda de *K1* és de 20.000 unitats de cabal, constant per tots els períodes. El detall es troba a la Taula 6.18:

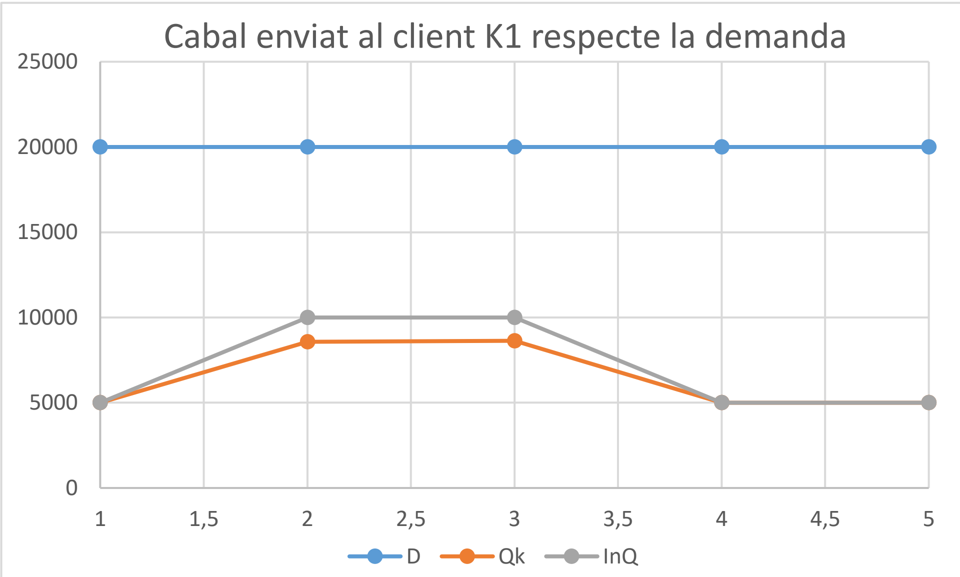
Taula 6.18 Caracterització Clients Cas d'estudi Model 5

	$MaxC_{C1K}$	D_K	$Binf_k$	$Pinf_k$	$Bsup_k$
K1	20	20000	15	15	-1
K10	60	30000	1	0,5	0

6.6.5. Resultats

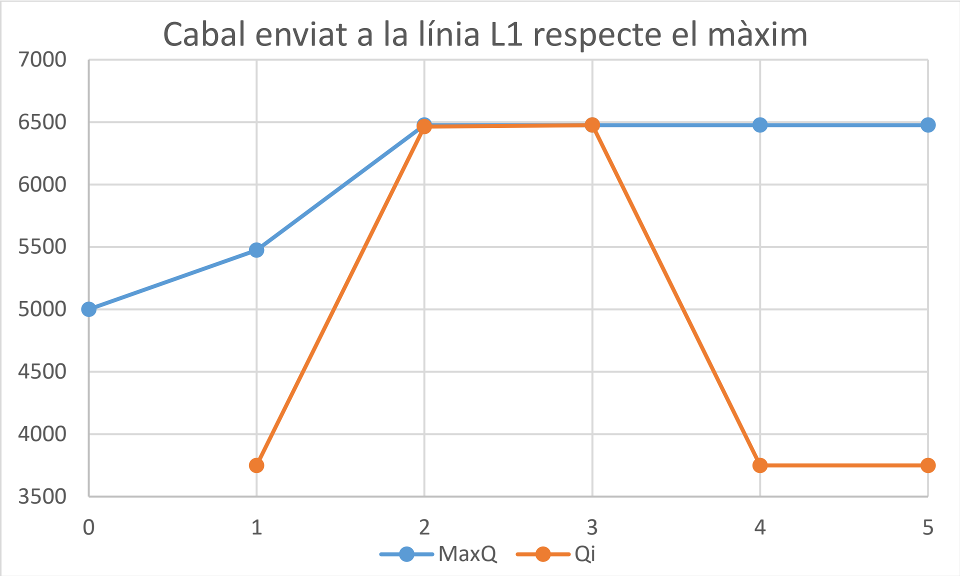
Aquest cas d'estudi és resolt amb GAMS versió 23.8.2, utilitzant el *solver* COUENNE en $20000\ segons$.

Degut al gran benefici que té *K1* en comparació a *K10*, cal esperar que la *supply chain* òptima per aquest cas d'estudi vagi enfocada a satisfer el màxim possible al client *K1*. Al Gràfic 6.19 es pot observar com cada període s'envia quasi tota l'aigua (InQ_t) al client *K1* (Qk_{K1t}). La demanda es troba molt per sobre d'ambdós.



Gràfic 6.19 Cabal enviat al client K1 respecte la demanda Cas d'estudi Model 5

Si *K1* és molt més atractiu econòmicament que *K10*, perquè s'està enviant aigua a *K10*? La resposta es troba al Gràfic 6.20. El cas d'estudi ha sigut dissenyat per comprovar les expansions; tant la seva detonació com la negació a realitzar-les. En aquest cas, l'entrada d'aigua puja de $5000\ u.c.$ a $10000\ u.c.$ només per tornar a disminuir, com es pot observar al Gràfic 6.19.



Gràfic 6.20 Cabal enviat a la línia L1 respecte el màxim, Cas d'estudi Model 5

Amb l'entrada d'aigua i marge per part de la demanda del client *K1*, les expansions es produeixen. Tanmateix, pels períodes *t4* i *t5* el model es troba amb que l'entrada d'aigua torna a disminuir, i les expansions passen a ser inservibles. Igualment, el *solver* COUENNE calcula que el més econòmic és realitzar les expansions de totes maneres. Aquestes expansions es produeixen exactament fins el valor de $6475{,}54\ u.c.$, punt en que la compensació pel client *K1* gràcies a l'aigua més neta tractada per *L1* s'iguala amb el cost de realitzar les expansions.

7. Cas EDAR Gavà-Viladecans

A l'apartat anterior s'han exposat els models elaborats, incloent casos d'estudi amb l'objectiu de verificar el seu bon funcionament. No obstant això, per realitzar una bona comparativa entre models és necessari un únic cas d'estudi per veure les respostes dels diferents models en una mateixa situació.

Donades les notables diferències estructurals entre els models, no és possible executar un cas d'estudi idèntic a tots ells. Això suposa un problema a l'hora de realitzar la comparativa i que aquesta sigui fiable. La solució passa per basar aquest casos d'estudi en una mateixa realitat per minimitzar les seves diferències.

La realitat a modelar és la de l'EDAR Gavà-Viladecans, la qual ha estat la inspiració del projecte des del seu inici. Per tant, es pren com a únic cas d'estudi aquesta EDAR, havent de realitzar canvis entre les especificacions de cada model per que aquests puguin ser executats. La disposició d'aquesta EDAR s'ha explicat anteriorment a l'apartat 2.4.

7.1. Comparació entre models

Els models presentats no poden executar un mateix cas d'estudi en la mesura en que no requereixen els mateixos paràmetres per definir la realitat i, internament, no operen amb les mateixes variables. Aquestes diferències se sortejaran en la mesura de lo possible per poder comparar els resultats.

De fet, aquestes diferències també es veuran reflectides als resultats i, per tant, podran ser objecte d'estudi i comparació.

7.1.1. Línies

La modelització de les línies de tractament és possiblement la part més rellevant dels models, ja que és el que aporta valor a l'aigua i fa possible que després sigui venuda, aportant benefici.

7.1.1.1. Tractament d'aigua

En cap model s'inclouen les equacions internes de les línies per modelar el tractament en detall. És més, es tracten de *caixes negres*, ja que es considera que aquest detall intern no aportava valor al projecte.

No obstant això, el tracte d'aquestes línies té una complexitat creixent fins arribar al punt de poder discretitzar un mode d'operació. De fet, virtualment, aquesta discretització podria ser infinitesimal per modelar a la perfecció la relació entre l'eficiència i el cost. De fet, una vegada coneguda l'eficiència i el seu cost associat, qualsevol altre aspecte de la modelització de les línies perd tota importància.

7.1.1.2. Cost i restriccions

Com ja s'ha comentat, el cost associat al tractament a les línies passa de ser independent i fixe, al model 1, a ser linealment dependent de l'eficiència, a partir del model 4. Aquest salt suposa un increment notable en la qualitat de la modelització.

El cabal d'entrada està restringit en primera instància per paràmetres lligats a les línies. Més endavant, al model 4, canvien a dependre de les receptes, essent sempre constants. Això canvia al model 5, on el màxim cabal d'entrada pot ser subjecte d'expansions, convertint aquest paràmetre en una variable.

7.1.2. Clients

L'altre secció del problema a modelar és la dels clients. És de gran importància ja que l'únic benefici que es pot obtenir es mitjançant la venta d'aigua regenerada als clients.

7.1.2.1. Benefici

La modelització del benefici aportat pels clients ha passat per diverses etapes en el model. Per començar, al model 1 ni tan sols es disposa de demanda; simplement s'han de cobrir les necessitats de qualitat de l'aigua per poder enviar-la. Més endavant, al model 2, s'inclou el concepte de demanda, així com el paràmetre p_k per modelar dos tipus diferents de models. Seguidament, aquesta representació es transforma matemàticament al model 3 amb les variables f_{kt}

Com a última millora, a partir del model 4, els clients es modelen amb tres paràmetres que defineixen el benefici o cost a rebre en funció del cabal enviat i la demanda desitjada. El seu funcionament ja s'ha explicat a l'apartat 6.5.3.6.

7.1.3. Resum

Resulta molt difícil mantenir la pista d'aquestes actualitzacions en la manera de tractar el model. Per facilitar-ho, es disposa la taula resum

Taula 7.1 Comparativa resum dels diferents models

	Model 1	Model 2	Model 3	Model 4	Model 5

Set Períodes		X	X	X	X
Demanda		X	X	X	X
Tipus de clients p_k		X	X		
Linealització f_{kt}			X		
Definició clients $B_{inf}, P_{inf}, P_{sup}$				X	X
Receptes				X	X
Eficiència variable				X	X
Expansions					X

Aquestes distincions són importants ja que indiquen com ha de ser definit el cas d'estudi per cada model. Seguidament es defineix el cas d'estudi adaptat segons el model.

7.2. Cas d'estudi

Per poder definir un mateix cas d'estudi en diversos models, es decideix que la manera més efectiva d'operar és començant pel més complex, el model 5 i continuar decreixent la complexitat. Alguns dels paràmetres que s'especifiquen pel cas de l'EDAR Gavà-Viladecans són similars a alguns ja exposats en casos anteriors, ja que les seves dades han servit d'inspiració durant tot el projecte.

El cas d'estudi es planteja amb 10 períodes, les 3 línies anteriorment vistes (IFAS, MBR, SF) i 10 clients amb diferents necessitats, amb una demanda constant entre períodes:

Tabla 7.1 Informació Clients Cas d'estudi GV

MaxC	K1	K2	K3	K4	K5	K6	K7	K8	K9	K10
SS	35	10	20	20	35	35	35	35	35	35
DBO	10	12,6	12,6	4,2	4,2	21	21	16,8	8	50
DQO	60	123	123	30	30	216	216	120	27	250
NI	1	1	1	1	1	9999	9999	1	9999	9999
EC	1	0	0,2	0,1	1	10	10	1	9999	9999
N	30	80	45,72	80	11,44	80	11,44	45,76	12	20
P	3	10	5,555	10	1,11	10	1,11	4,44	2	10
Demanda	35	10	20	20	35	35	35	35	35	35

p	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Binf	0	0,648	0,666	0,807	0,843	0,489	0,525	0,795	0,844	0
Pinf	0,821	0	0	0	0	0	0	0	0	0,1
Bsup	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0

L'entrada d'aigua es varia, simulant possibles pertorbacions, per veure la reacció dels models. Pel que fa als contaminants caracteritzats, s'inclouen, a part dels que ja tenen en compte a l'EDAR, aquells que contempla el RD 1620/2007 (Gobierno de España 2007) per acceptar una aigua regenerada segons l'ús. Aquests nous contaminants són la concentració d'ous de Nematodes Intestinals (NI) i les unitats formadores de colònies (UFC) de *E. Coli* per cada $100\mu L$ d'aigua.

Tabla 7.2 Informació entrada Cas d'estudi GV

InQ_t $\left[\frac{m^3}{dia}\right]$	t1	t2	t3	t4	t5	t6	t7	t8	t9	t10
	10.000	20.000	30.000	40.000	50.000	40.000	40.000	50.000	40.000	40.000

InC_{jt}	SS	DBO	DQO	NI	EC	N	P
	300	300	600	10	10	70	10
Unitats	$[mg/l]$	$[mgO_2/l]$	$[mgO_2/l]$	$[ous/10l]$	$[UFC/100\mu L]$	$[mg/l]$	$[mg/l]$

7.3. Resultats

Amb aquest cas d'estudi complet s'intenta posar a prova l'actuació real dels models. A la Taula 7.2 es troba un resum dels resultats obtinguts amb cada model, tots realitzats amb la versió 24.4.6 de GAMS i el solver BARON corresponent:

Taula 7.2 Resultats del cas d'estudi general amb GAMS 24.4.6

	Model 1	Model 2	Model 3	Model 4	Model 5
Temps de CPU [s]	12,71	100.000 (límit)	30.000 (límit)	45.7	0.43
Número d'equacions	185	2051	2851	4541	4544
Variables contínues	138	1481	1881	2441	2531
Variables discretes	0	100	100	160	190

Solver	Solució normal	Límit de temps	Límit de temps	No resolt	Solució normal
Model	Òptim local	Solució amb enters	Solució no retornada	Error desconegut	Sense solució
Funció Objectiu	13.314,4	170.627,42	-	-	-

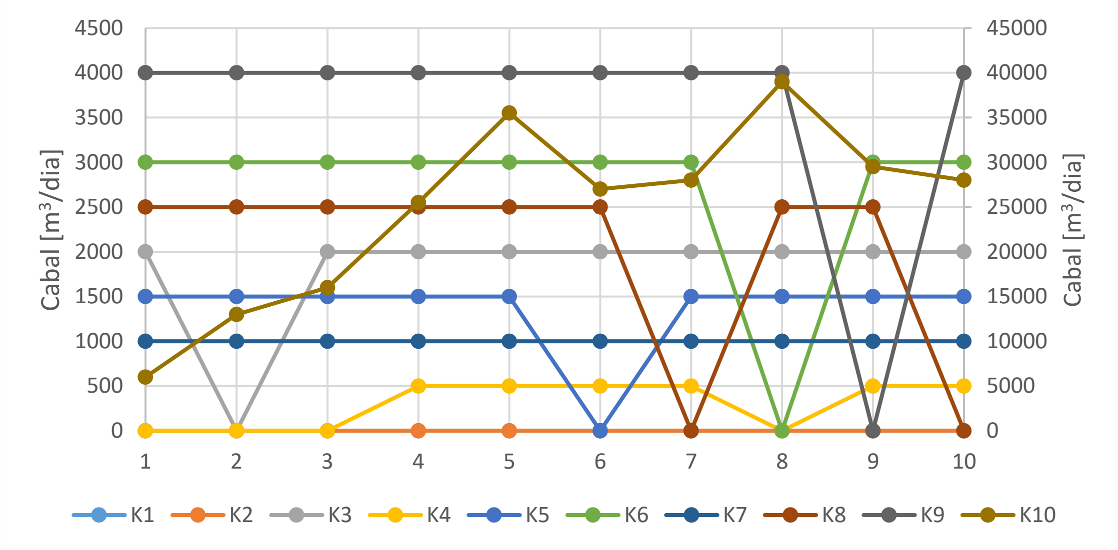
Degut a la simplicitat del model 1, aquest és resolt sense problemes. El seu resultat està enfocat a satisfer al client K8. En aquest, ja que al model 1 no hi ha demandes, K8 rep tota l'aigua.

Pel que fa al model 2, BARON troba una solució factible amb els enters no relaxats. No obstant això, aquesta solució consisteix en enviar tota l'aigua al client K10 a tots els períodes, sense cap tipus d'interès en explorar les altres demandes. Aquesta és evidentment una solució no òptima. A més, aquest resultat és molt similar al punt inicial que es proporciona a GAMS per agilitzar la resolució del problema.

Pel que fa als altres models, ni tan sols retornen una solució factible no òptima. Això indica que, assumint que els models funcionen, ja que han sigut provats a altres apartats d'aquest projecte, el cas d'estudi és massa complicat per que el *solver* trobi una solució. I és que, observant el model 5, es pot veure com ha de resoldre 4.544 equacions manipulant 2.721 variables, essent 190 d'aquestes binàries.

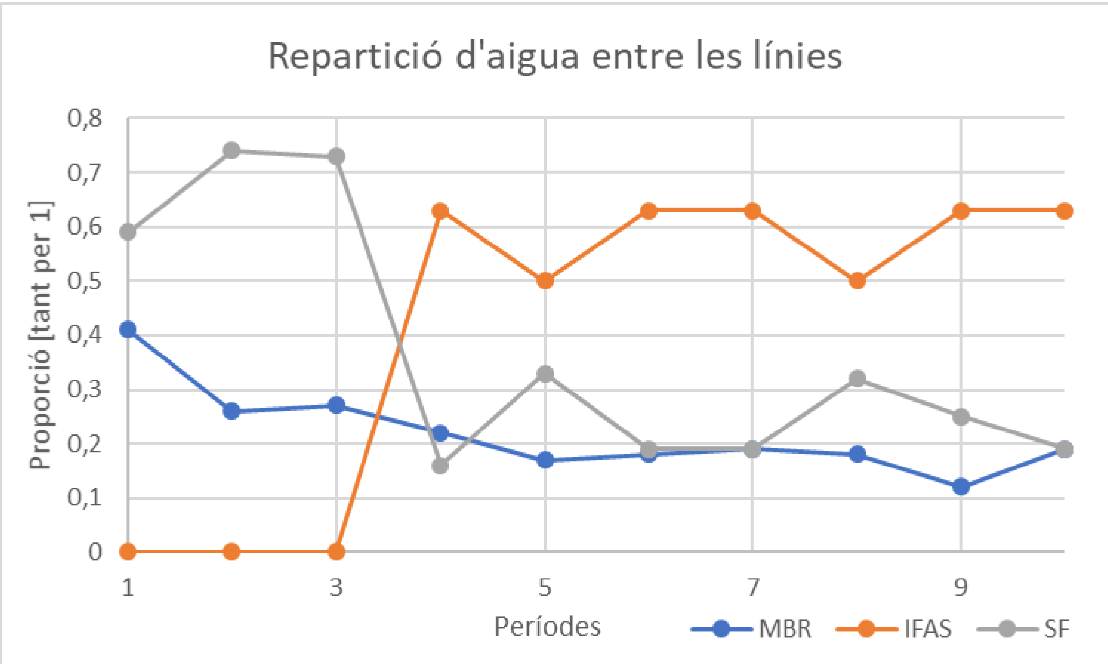
De fet, el model 5, amb el cas d'estudi de l'EDAR de Gavà-Viladecans, suma 7.265 variables i equacions. Tal i com va reflexionar Arne Drud (Drud), un *solver* global tindrà problemes per resoldre un model amb un número de variables i equacions de l'ordre de 10.000. En un cas com aquest, per tant, no s'hauria d'utilitzar BARON, sinó un solver local. El problema dels *solvers* locals és que, per trobar la solució òptima d'un model no convex solen necessitar un punt inicial proper. El fet de que sigui proper és molt relatiu. És possible que el model requereixi d'una proximitat molt gran, com s'ha vist al Cas d'estudi 2 del model 2 i a l'Annex B. En casos complexos, com ho son els reals, no és eficient haver de calcular un punt proper.

Degut als resultats poc satisfactoris amb BARON de GAMS 24.4.6, es proba de resoldre el model 2 també amb el mateix *solver*, aquesta vegada de la versió 27.1. Els resultats són millors que els obtinguts amb la versió més antiga, tot i tampoc assegurar la optimitat del resultat. Això demostra que els *solvers* de NLP i MINLP estan encara en fase de desenvolupament. Al Gràfic 7.1 es presenta el repartiment d'aigua entre els clients obtingut, on K10 es representa a l'eix secundari .



Gràfic 7.1 Repartiment de l'aigua tractada entre els clients

No hi ha explicació pels pics de baixada que es poden observar al Gràfic 7.1. Són el resultat d'una optimització incompleta. Pel que fa al tractament de l'aigua enviada, al Gràfic 7.2 es troba la repartició entre les línies al llarg dels períodes. Les disminucions en la proporció d'aigua tractada per la línia MBR es veuen reflectides al Gràfic 7.1 com els pics invertits d'aigua regenerada enviada als clients. Es pot dir, per tant, que es possible que es tracti d'una solució correcta, tal i com reporta BARON, però no òptima, degut a que aquests pics no tenen cap explicació.



Gràfic 7.2 Tant per 1 de repartició d'aigua entre les línies

8. Anàlisi econòmica

Per conèixer la viabilitat real del projecte realitzat, cal realitzar una anàlisi econòmica tenint en compte tot el capital invertit des de el seu inici fins la seva cloenda.

Per començar, els costos es divideixen en 3:

- Cost humà

El cost humà implicat a aquest projecte és relativament senzill de calcular. Hi ha treballat un enginyer químic sense experiència professional un total de 720 hores, calculades aproximadament a partir del temps dedicat a un ECTS (30h) i sabent que un treball de fi de grau són 24 ECTS.

Pel que fa al preu d'aquestes hores, s'ha de recórrer a les estadístiques. Un enginyer de les característiques esmenades cobra de mitja $22.000\ €/mes$ bruts. Això equival, amb una cotització a la seguretat social del 23,6% («Seguridad Social: Cotización») i una jornada de $1800\ h$ a l'any (Gobierno de España 2018), al l'equació (Eq. 8.1):

$$\mathbf{22.000\frac{€}{\cancel{any}}\cdot 1,236\cdot\frac{\cancel{any}}{1800\mathit{h}} = 15,11\frac{€}{\mathit{h}};\ 15,11\frac{€}{\mathit{h}}\cdot 720\mathit{h} = 10.876,8\ €} \qquad \textbf{(Eq. 8.1)}$$

- Cost *software*

En aquest projecte s'han utilitzat diversos programes d'accés no lliure, amb un cost no negligible, com son:

Taula 8.1 Resum cost software del projecte

Producte	Preu	Font
GAMS	*Base Module → 3200 $* *BARON → 3200 $* *CONOPT → 3200 $* *DICOPT → 1600 $* *SBB → 1600 $* *Local solver-link → 3200 $*	(GAMS 2019)
Office Profesional 2019	579 €	(«Comprar Office Profesional 2019 - Microsoft Store es-ES»)

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

En total, amb la conversió de $0{,}8912$ €/\$ («Cotización EUR/USD - Investing.com»), resulta d'un cost de *software* de $14.838{,}2$ €. Evidentment, no es compren aquest productes només per aquest projecte. S'aplica un coeficient raonable de 0.1 per simular que l'ús en aquest projecte és una desena de l'ús que tindran aquests productes. El cost final vinculat a aquest projecte és el de$1.483{,}82$ €.

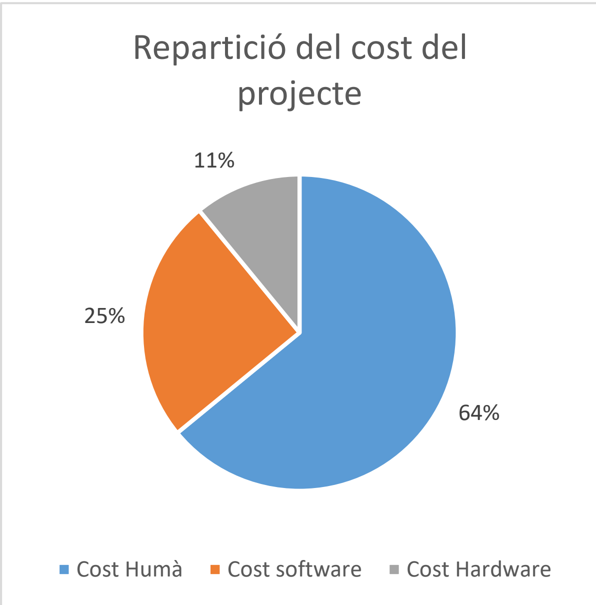
- Cost *hardware*

S'estima en 1.000€ el cost de la maquinària específica utilitzada pel projecte, incloent-hi monitor, ordinador, teclat i ratolí. A més, altres costos físics com l'electricitat o la connexió a internet derivats del treball d'oficina s'estimen en 500€. No obstant això, el mateix coeficient que s'ha aplicat cost *software* s'aplica en aquest cas a la maquinària adquirida, ja que tampoc són productes d'utilitzar i tirar. $100€ + 500€ = 600$ € de cost de *hardware*.

En resum, el cost total del projecte es troba a la Taula 8.2:

Taula 8.2 Resum del cost econòmic associat al projecte

Cost humà	Cost software	Cost hardware	Cost total
$\mathbf{10.876,8}$ €	1.483,82 €	600 €	12.960,62 €



Gràfic 8.1 Resum del cost econòmic associat al projecte

El següent pas es conèixer el benefici que aporta el producte desenvolupat. El treball realitzat consisteix en l'optimització de la xarxa d'aigua regenerada. Per tant, el benefici que s'obtindria d'aquest projecte no es pot comptabilitzar com l'obtingut en passar d'una *supply chain* sense regeneració d'aigua a una xarxa d'aigua regenerada optimitzada. El model és responsable de l'optimització, però no de la implantació de la xarxa. I és que canvi complert genera molts beneficis, com s'ha vist al Cas d'estudi 2 del model 2, però també inclou grans inversions associades (xarxa de canonades per portar l'aigua regenerada a cada client). Això dificulta el càlcul del benefici net aportat per l'optimització que realitza el model.

De totes maneres, s'ha demostrat que l'aigua regenerada ha creat un mercat en expansió. La seva explotació, prenent per raonables els paràmetres del Cas d'estudi 2 del model 2, pot estalviar fins a $5000\frac{€}{dia}$ a una planta de tractament d'aigües residuals similar a l'EDAR Gavà-Viladecans. El fet que l'optimització resulti en "deixar de perdre" una certa quantitat de diners, per molt gran que sigui aquesta, no genera l'escenari perfecte per incentivar les inversions. No obstant això, és evident que aquesta inversió de $\sim 13000€$ estaria que justificada gràcies a la magnitud dels beneficis potencials.

9. Impacte ambiental

En contraposició a l'apartat anterior 8, on es desglossen els costos econòmics associats al projecte, a l'impacte ambiental es llisten els avantatges ambientals que se'n poden derivar. De la regeneració de l'aigua i les seves avantatges ja se n'ha parlat durant el projecte (Aigua regenerada), però en aquest apartat és moment d'analitzar com pot impactar aquest projecte en l'actual manera de tractar-la.

És cert que ja s'està reutilitzant aigua regenerada a plantes catalanes. No obstant això, només un 3.7% de l'aigua tractada a les EDAR de l'AMB es regenera. (2.1) («Cicle i recursos hídrics - AMB»). Si bé és cert que depurant l'aigua i retornant-la al mar ja s'està contribuint al cicle clàssic de l'aigua, la regeneració ofereix una "drecera" o un recicle intern al cicle superior.

Els models exposats no són capaços d'implementar per si sols una cultura de regeneració de l'aigua. Tanmateix, sí que són útils per demostrar els avantatges econòmics que té i motivar, així, un viratge cap a l'economia circular. I és que, com s'ha vist a 6.5.5. Resultat, la qualitat de les línies de tractament emergents té potencial per extraure valor a l'aigua residual, un recurs que es pren per inservible. Degut al problema de l'aigua que pateix el nostre planeta, el fet de poder reutilitzar un recurs hídric no es pot desaprofitar.

Tota l'aigua que les indústries, jardins, centres comercials, etc. puguin utilitzar provinent d'una EDAR és aigua potable que no estan utilitzant i que es pot estalviar. La realitat és que, com recull (Ministerio de la Presidencia. Gobierno de España 2007) no sempre és necessària una qualitat potable per tots els usos possibles de l'aigua. Això es tradueix en un estrès hídric menor per la zona d'actuació de les EDAR regenerant aigua, ja que el cabal a extraure per les potabilitzadores serà menor.

Un futur on l'aigua potable sigui només la que hem de beure és més que assolible, però que necessita de inversions titàniques per part de les empreses públiques i els governs, cosa que sempre és difícil. En aquest futur, l'aigua de les piques seria potable, mentre que altres usos d'aigua (mànegues, cisternes, ...) serien de qualitat suficient pels seus usos, però no potable. Això requeriria de una duplicació de les canonades a totes les cases, un esforç econòmic per qualsevol potència mundial. Ara bé, tenint en compte notícies com la següent: («Brujas instala una cañería de 3 kilómetros para llevar cerveza»), és evident que l'únic que fa falta és conscienciació i motivació.

D'altra banda, la creació dels models en sí mateixa, així com l'elaboració d'aquest projecte no han tingut cap impacte mediambiental significatiu.

Conclusions

A la vista del projecte realitzat, s'extrauen les següents conclusions:

- S'han desenvolupat 5 models amb diferents graus de complexitat i s'han implementat utilitzant el software GAMS. S'ha realitzat una comparació entre les seves característiques principals.
    - El primer model és una primera aproximació en forma de NLP.
    - Pel segon model s'ha inclòs el tractament de les demandes dels clients receptors d'aigua regenerada. Passa a ser, com els següents, MINLP.
    - El tercer model és una reformulació matemàtica del segon que utilitza el mètode de la Big M per linealitzar algunes parts de la funció objectiu.
    - El quart model inclou els modes d'operació amb eficiència variable, anomenats *receptes*, i un canvi en l'enfoc del càlcul del benefici aportat pels clients.
    - El cinquè model culmina amb la possibilitat de realitzar expansions a les capacitats de les línies de tractament de l'estació modelada.
- S'han aportat casos d'estudi per verificar que, en efecte, els models reaccionen com s'espera. S'han utilitzat diversos solvers, realitzant una crítica al seu funcionament i distingint els avantatges i inconvenients de cada tipus. Es conclou que *solvers* globals, com BARON, no són capaços de resoldre problemes de la mateixa mida que els *solvers* locals, però aquests requereixen de punts inicials precisos. A més, els *solvers* globals requereixen bons límits tant a variables com a equacions. L'elecció depèn del cas concret.
- Al cas d'estudi resolt al model 4 es compara la solució òptima amb l'operació estàndard de l'estació Gavà-Viladecans, on l'aigua es tracta 50/50 i es reparteix entre un client i el mar. Dona un resultat de 5000 unitats a la funció objectiu menor que el mateix cas optimitzat.
- Els models han sigut provats al cas real de l'EDAR Gavà-Viladecans, en la que el model 1 i 2 han trobat solució, a diferencia dels models de complexitat superior (3, 4 i 5) que no han convergit a cap solució factible.

El projecte demostra la viabilitat de l'estudi de la gestió de la planta de tractament d'aigües dins d'un hipotètic mercat d'aigua regenerada. Certament, es fa palès que els models i els seus mètodes de càlcul no són suficientment confiables i robustos com per, actualment, ser implementats en estacions reals. Segurament, caldria invertir tant en un esforç de reformulació dels models com en l'adquisició de solvers de darrera generació, més ràpids i robustos. No obstant això, compleixen la funció de demostrar que hi ha molt marge a l'optimització no només ambiental sinó també econòmica.

Bibliografia

3.2 Biològic: Aerobi i Anabeori. A: [en línia]. [Consulta: 26 abril 2019]. Disponible a: https://tecnologiaisostenibilitat.cus.upc.edu/continguts/tractaments-i-depuracio-daigues/3.-els-principals-sistemes-de-tractaments/3.2-biologic-aerobi-i-anabeori.

Ahmed, F.E., Hashaikeh, R. i Hilal, N., 2019. Solar powered desalination – Technology, energy and future outlook. A: *Desalination* [en línia]. Elsevier, Vol. 453, p. 54-76. ISSN 0011-9164. DOI 10.1016/J.DESAL.2018.12.002. [Consulta: 25 abril 2019]. Disponible a: https://www-sciencedirect-com.recursos.biblioteca.upc.edu/science/article/pii/S0011916418321258.

Ahmed, S. et al., 2007. Physico-Chemical Processes. A: *Waste Management Series*. Vol. 79, núm. 10, p. 171-218. DOI 10.2175/106143007x218395.

Aigua Regenerada | AREMA S.A. A: [en línia]. [Consulta: 9 abril 2019]. Disponible a: https://www.arema.com/ca/solucions/aigua-regenerada.

Àrea Metropolitana de Barcelona., 2018. *BOPB: Aprovació definitiva del text refós del Reglament metropolità d'abocament d'aigües residuals.* Barcelona:

BARON. A: [en línia]. [Consulta: 23 abril 2019]. Disponible a: https://www.gams.com/latest/docs/S_BARON.html#BARON_LICENSING_AND_SOFTWARE_REQUIREMENTS.

Belotti, P., 2019. *Couenne: A User's Manual*.

Beychok, M., 1967. *Aqueous Wastes from Petroleum and Petrochemical Plants*. ISBN (No ISBNs in 1967. LCN 67-19834).

Bisschop, J. i Entriken, R., 1993. *AIMMS--The modeling system. Paragon decision technology*. The Netherlands: Haarlem:

Brujas instala una cañería de 3 kilómetros para llevar cerveza. A: [en línia]. [Consulta: 1 maig 2019]. Disponible a: https://www.elperiodico.com/es/sociedad/20160920/brujas-cerveza-tuberia-fabrica-embotelladora-5389030.

Cambio Euro Dólar estadounidense | Cotización EUR/USD - Investing.com. A: [en línia]. [Consulta: 30 abril 2019]. Disponible a: https://es.investing.com/currencies/eur-usd.

Campos, N., 2015. Aplicaciones lineales. A: *Universidad de Cantabria*. Vol. 1, p. 1-18.

Cicle i recursos hídrics - Àrea metropolitana de Barcelona. A: [en línia]. [Consulta: 25 abril 2019]. Disponible a: http://www.amb.cat/s/web/medi-ambient/aigua/cicle-aigua/cicle-i-recursos-hidrics.html.

Ciclo y recursos hídricos - Àrea metropolitana de Barcelona. A: [en línia]. [Consulta: 25 abril 2019]. Disponible a: http://www.amb.cat/s/es/web/medi-ambient/aigua/cicle-aigua/cicle-i-recursos-hidrics.html.

Comprar Office Profesional 2019 - Microsoft Store es-ES. A: [en línia]. [Consulta: 30 abril 2019]. Disponible a: https://www.microsoft.com/es-es/p/office-profesional-2019/cfq7ttc0k7c5?activetab=pivot:overviewtab.

Couenne. A: [en línia]. [Consulta: 24 abril 2019]. Disponible a: https://www.gams.com/latest/docs/S_COUENNE.html.

Dawei, L., 2011. *Fundamentals of Supply Chain Management*. ISBN 9788776817985. DOI 10.1007/978-3-540-24816-3_1.

DICOPT. A: [en línia]. [Consulta: 24 abril 2019]. Disponible a: https://www.gams.com/latest/docs/S_DICOPT.html#DICOPT_ALGORITHM.

Drud, A.CONOPT. A: [en línia]. ISBN 182.3738740159. [Consulta: 23 abril 2019]. Disponible a: https://www.pik-potsdam.de/research/transformation-pathways/models/remind/conopt.pdf.

EDAR de Gavà i Viladecans. A: [en línia]. [Consulta: 26 abril 2019]. Disponible a: http://www.amb.cat/es/web/medi-ambient/aigua/instalacions-i-equipaments/detall/-/equipament/edar-de-gava-i-viladecans/269712/11818.

Ellen MacArthur Foundation., 2017. What is a Circular Economy? | Ellen MacArthur Foundation. A: *Ellen MacArthur Foundation* [en línia]. Disponible a: https://www.ellenmacarthurfoundation.org/circular-economy/concept.

Floudas, C.A. i Misener, R., 2013. *ANTIGONE*.

Fourer, R., 2013. Algebraic Modeling Languages for Optimization. A: *Encyclopedia of Operations Research and Management Science*. p. 43-51. DOI 10.1007/978-1-4419-1153-7_25.

Fourer, R., Gay, D.M. i Kernighan, B.W., 1993. AMPL: A mathematical programming language. A: *OR Spektrum*. Vol. 15, núm. 1, p. 43-55. ISSN 01716468. DOI 10.1007/BF01783416.

GAMS., 2019. Standard Price List. A: [en línia]. [Consulta: 30 abril 2019]. Disponible a: www.gams.com.

GAMS - Introduction. A: [en línia]. [Consulta: 23 abril 2019]. Disponible a: https://www.gams.com/products/introduction/.

GAMS - Simple Example. A: [en línia]. [Consulta: 23 abril 2019]. Disponible a: https://www.gams.com/products/simple-example/.

GAMS Data eXchange (GDX). A: [en línia]. [Consulta: 24 abril 2019]. Disponible a: https://www.gams.com/latest/docs/UG_GDX.html.

Gobierno de España., 2018. *Actualización salarios Convenio colectivo del sector de empresas de publicidad* [en línia]. Disponible a: https://www.boe.es/diario_boe/txt.php?id=BOE-A-2018-7892.

Grasso, D., 2006. Thermal Processes. A: *Waste Management Series*. p. 405-467. DOI 10.1201/9780203752265-11.

Grossmann, I. et al., 2002. *GAMS/DICOPT: A discrete continuous optimization package*.

Grossmann, I.E. i Karuppiah, R., 2006. Global optimization for the synthesis of integrated water systems in chemical processes. A: *Computers and Chemical Engineering*. Vol. 30, núm. 4, p. 650-673. ISSN 00981354. DOI 10.1016/j.compchemeng.2005.11.005.

Grossmann, I.E., Martín, M. i Yang, L., 2014. Review of optimization models for integrated process water networks and their application to biofuel processes. A: *Current Opinion in Chemical Engineering*. Vol. 5, p. 101-109. ISSN 22113398. DOI 10.1016/j.coche.2014.07.003.

Haas, W. et al., 2016. How Circular Is the Global Economy? A Sociometabolic Analysis. A: . p. 259-275. ISBN 978-3-319-33324-3. DOI 10.1007/978-3-319-33326-7_11.

Johnson, T.L., McQuarrie, J.P. i Shaw, A.R., 2012. Integrated Fixed-Film Activated Sludge (Ifas): the New Choice for Nitrogen Removal Upgrades in the United States. A: *Proceedings of the Water Environment Federation*. Vol. 2004, núm. 16, p. 296-318. ISSN 1938-6478. DOI 10.2175/193864704784147214.

Junkins, J.L. i Singla, P., 2003. How Nonlinear is It? A Tutorial on Nonlinearity of Orbit and Attitude Dynamics. A: *Advances in the Astronautical Sciences*. Vol. 115, núm. SUPPL., p. 1-45. ISSN 00653438.

Khan, M.A. et al., 2018. Can membrane bioreactor be a smart option for water treatment? A: *Bioresource Technology Reports* [en línia]. Elsevier, Vol. 4, núm. June, p. 80-87. ISSN 2589014X. DOI 10.1016/j.biteb.2018.09.002. Disponible a: https://doi.org/10.1016/j.biteb.2018.09.002.

Kullenberg, G., 2006. Physical Processes. A: *Waste Management Series*. Vol. 5, p. 1-89. DOI 10.1201/9781351075855.

Levenspiel, O., 2000. Modeling in chemical engineering. A: *Hyle*. Vol. 6, núm. 2, p. 101-116. ISSN 14335158.

Martin, C., 2011. *Logistics & Supply Chain Management* [en línia]. ISBN 9780273731122. DOI 10.1007/s12146-007-0019-8. Disponible a: http://www.springerlink.com/openurl.asp?id=doi:10.1023/B:BTTJ.0000047119.22852.38.

Michael Niaounakis, C.P.H., 2006. Biological Processes. A: *Waste Management Series*. Vol. 5, p. 171-218.

Ministerio de la Presidencia. Gobierno de España., 2007. Real Decreto 1620/2007, de 7 de diciembre, por el que se establece el régimen jurídico de la reutilización de las aguas depuradas. A: *Boe* [en línia]. p. 46932-46946. ISSN 1356-3890. DOI 10.1177/1098214013478146. Disponible a: http://www.boe.es/aeboe/consultas/bases_datos/doc.php?id=BOE-A-2008-18947.

Model and Solve Statements. A: [en línia]. [Consulta: 9 abril 2019]. Disponible a: https://www.gams.com/latest/docs/UG_ModelSolve.html#UG_ModelSolve_ModelClassificationOfModels.

Partsch, H.A. i Partsch, H.A., 2012. Basic Transformation Techniques. A: *Specification and Transformation of Programs*. p. 149-188. DOI 10.1007/978-3-642-61512-2_4.

Pimentel, D. i Burgess, M., 2018. World Human Population Problems. A: [en línia]. Elsevier, p. 313-317. DOI 10.1016/B978-0-12-809665-9.09303-4. [Consulta: 25 abril 2019]. Disponible a: https://www-sciencedirect-com.recursos.biblioteca.upc.edu/science/article/pii/B9780128096659093034.

Pishvaee, M.S., Rabbani, M. i Torabi, S.A., 2011. A robust optimization approach to closed-loop supply chain network design under uncertainty. A: *Applied Mathematical Modelling* [en línia]. Elsevier Inc., Vol. 35, núm. 2, p. 637-649. ISSN 0307904X. DOI 10.1016/j.apm.2010.07.013. Disponible a: http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2010.07.013.

Preus i tarifes - Aigües de Barcelona. A: [en línia]. [Consulta: 21 abril 2019]. Disponible a: http://www.aiguesdebarcelona.cat/facturadelaigua/preus-tarifes/.

Ramezani, M., Kimiagari, A.M. i Karimi, B., 2014. Closed-loop supply chain network design: A financial approach. A: *Applied Mathematical Modelling* [en línia]. Elsevier Inc., Vol. 38, núm. 15-16, p. 4099-4119. ISSN 0307904X. DOI 10.1016/j.apm.2014.02.004. Disponible a: http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2014.02.004.

Rayner, M.E. i Bender, E.A., 2007. An Introduction to Mathematical Modelling. A: *The Mathematical Gazette*. Vol. 64, núm. 427, p. 70. ISSN 00255572. DOI 10.2307/3615903.

Ridoutt, B. i Pfister, S., 2010. *A revised approach to water footprinting to make transparent the impacts of consumption and production on freshwater scarcity*. DOI 10.1016/j.gloenvcha.2009.08.003.

Rosenthal, R.E., 1998. *GAMS A USER ' S GUIDE by : by :* South San Francisco: ISBN 2219499170.

SBB. A: [en línia]. [Consulta: 23 abril 2019]. Disponible a: https://www.gams.com/latest/docs/S_SBB.html.

Seguridad Social: Cotización / Recaudación de Trabajadores. A: [en línia]. [Consulta: 30 abril 2019]. Disponible a: http://www.seg-social.es/wps/portal/wss/internet/Trabajadores/CotizacionRecaudacionTrabajadores/36537#36538.

Somoza, A. et al., 2016. Long-term planning and retrofitting of supply and distribution chains with decaying performance. A: [en línia]. Elsevier, Vol. 38, p. 823-828. ISSN 1570-7946. DOI 10.1016/B978-0-444-63428-3.50142-9. [Consulta: 15 abril 2019]. Disponible a: https://www-sciencedirect-com.recursos.biblioteca.upc.edu/science/article/pii/B9780444634283501429.

Tawarmalani, M. i Sahinidis, N. V., 2005. A polyhedral branch-and-cut approach to global optimization. A: *Mathematical Programming* [en línia]. Springer-Verlag, Vol. 103, núm. 2, p. 225-249. ISSN 0025-5610. DOI 10.1007/s10107-005-0581-8. [Consulta: 15 abril 2019]. Disponible a: http://link.springer.com/10.1007/s10107-005-0581-8.

Tenerife, C. de., 2019. Plan Territorial Especial de Ordenación de Residuos de Tenerife. Anexo I: Estudio nacional e internacional de modelos de gestión de residuos. A: . p. 106.

Van Hentenryck, P. i Lustig, I., 1999. *The OPL optimization programming language* [en línia]. MIT Press. ISBN 0262720302. [Consulta: 22 abril 2019]. Disponible a: https://dl.acm.org/citation.cfm?id=299293.

Annex A

Formulació a GAMS dels models:

A1. Model 1

```
*Model 1

$call gdxxrw.exe Modelg1.xlsx output=data.gdx par=Costi rng=Casestudy3!C2:D3 cdim=1 par=MaxQ rng=Casestudy3!C5:D6 cdim=1 par=MinQ rng=Casestudy3!C8:D9 cdim=1 par=Ef rng=Casestudy3!B11:E13 rdim=1 cdim=1 par=InQ rng=Casestudy3!H2 cdim=0 rdim=0 par=InC rng=Casestudy3!H5:J6 cdim=1 par=B rng=Casestudy3!H8:I9 cdim=1 par=MaxC rng=Casestudy3!G11:J13 rdim=1 cdim=1

OPTION NLP = COUENNE

  Sets

     i          Línies de tractament                /L1*L2/

     j          Contaminants                        /C1*C3/

     k          Clients                             /K1*K2/

  Parameters

     Costi(i)      Cost de utilitzar la linia 1 per un cabal 1

     MaxQ(i)       Màxim cabal que pot tractar la línia i

     MinQ(i)       Mínim cabal que pot tractar la línia i

     B(k)          Benefici que suposa el client k per un cabal 1

     InC(j)        Concentració contaminant j a l'entrada

     InQ           Cabal d'entrada a la planta

     Ef(i,j)       Eficiència de la línia i eliminant j

     MaxC(k,j)     Exigències de qualitat del client k pel contaminant j
```

```
gdxin data.gdx

$load Costi MaxQ MinQ Ef InQ InC B MaxC

$gdxin

  Display MaxQ, MinQ, B, InC, InQ, Ef, MaxC, Costi;

  Positive Variables

       X(i)          Tant per 1 que va a cada línia i

       Qi(i)         Cabal de sortida de cada línia i

       Ci(i,j)       Concentració de cada contaminant j a cada línia i

       Y(i,k)        Tant per 1 de distribució entre linies i clients (fixable)

       Ck(k,j)       Concentració del contaminant j en el corrent pel client k

       Qk(k)         Cabal que arriba al client k

  Variable

       z             Benefici OF;

  Equations

       X1                La suma de Xi ha de ser 1

       CalculQi            Càlcul del cabal de sortida de la línia i

       CalculCi            Càlcul de la concentració del contaminant j a la sortida de cada línia i

       RestriccY           Restricció Y 1

       CalculQk            Càlcul del cabal del corrent que va a cada client k

       CalculCk            Càlcul de la concentració del corrent que va a cada client k

       Qualitat            Cualitat client k pel contaminant j

       Maxcabal             Màxim cabal que pot tractar la línia i
```

```
    Mincabal          Mínim cabal que pot tractar la línia i

    Cost              Objective Function z;

X1..                          1 =e= sum(i, X(i));

CalculQi(i)..                 Qi(i) =e= X(i) * InQ;

CalculCi(i,j)..               Ci(i,j) =e= (1 - Ef(i,j)) * InC(j);

RestriccY (i)..               1 =e= sum(k, Y(i,k));

CalculQk(k)..                 Qk(k) =e= sum(i, Y(i,k) * Qi(i));

CalculCk(k,j)..               Ck(k,j) * sum(i, Y(i,k) * Qi(i)) =e= sum(i, Ci(i,j) * Qi(i) * Y(i,k));

Qualitat(k,j)..               MaxC(k,j) =g= Ck(k,j);

Maxcabal(i)..                 MaxQ(i) =g= Qi(i);

Mincabal(i)..                 MinQ(i) =l= Qi(i);

Cost..                        z =e= sum(k, Qk(k) * B(k)) - sum(i, Costi(i) * Qi(i));

Model EDAR1 /all/ ;

solve EDAR1 using NLP maximizing z;

Display X.l, Qi.l, Qk.l, Ck.l, Ci.l, Y.l, z.l;

*S'esriuen els resultats a EXCEL

FILE ID /ResultatsCS3,85.xls/;

PUT ID;

ID.pc = 6;

ID.pw = 32767;

PUT 'ResultatsCS3,85'/;

PUT '-----------'//;
```

```
PUT 'FO', PUT z.l, PUT /;

PUT 'InQ', PUT InQ, PUT/;

PUT '' loop(j, PUT j.tl) PUT /;

PUT 'InC', loop(j, PUT InC(j)) PUT //;

PUT '' loop(i, PUT i.tl) PUT /;

PUT 'X' loop(i, PUT X.l(i)) PUT /;

PUT 'Qi' loop(i, PUT Qi.l(i)) PUT /;

PUT 'MaxQ' loop(i, PUT MaxQ(i)) PUT /;

PUT 'MinQ' loop(i, PUT MinQ(i)) PUT //;

PUT '' PUT '' loop(j, PUT j.tl) PUT /;

PUT 'Ef' loop(i, PUT i.tl loop(j, PUT Ef(i,j)) PUT/ PUT '') PUT /;

PUT '' PUT '' loop(j, PUT j.tl) PUT /;

PUT 'Ci' loop(i, PUT i.tl loop(j, PUT Ci.l(i,j)) PUT/ PUT '') PUT /;

PUT '' PUT '' loop(k, PUT k.tl) PUT /;

PUT 'Y' loop(i, PUT i.tl loop(k, PUT Y.l(i,k)) PUT/ PUT '') PUT /;

PUT '' loop(k, PUT k.tl) PUT /;

PUT 'B' loop(k, PUT B(k)) PUT /;

PUT 'Qk' loop(k, PUT Qk.l(k)) PUT /;

PUT '' PUT '' loop(j, PUT j.tl) PUT /;

PUT 'Ck' loop(k, PUT k.tl loop(j, PUT Ck.l(k,j)) PUT/ PUT '') PUT /;

PUT '' PUT '' loop(j, PUT j.tl) PUT /;

PUT 'MaxCk' loop(k, PUT k.tl loop(j, PUT MaxC(k,j)) PUT/ PUT '') PUT /;
```

A2. Model 2

```
*Model 2

$call gdxxrw.exe Model2.xlsx output=data.gdx par=Costi rng=Sheet1!C2:E3 cdim=1 par=MaxQ rng=Sheet1!C5:E6 cdim=1 par=MinQ rng=Sheet1!C8:E9 cdim=1 par=Ef rng=Sheet1!B11:E14 rdim=1 cdim=1 par=InQ rng=Sheet1!H1:K2 cdim=1 par=InC rng=Sheet1!G4:K7 cdim=1 rdim=1 par=B rng=Sheet1!H12:I13 cdim=1 par=P rng=Sheet1!H14:I15 cdim=1 par=MaxC rng=Sheet1!G17:J19 rdim=1 cdim=1 par=d rng=Sheet1!G8:K10 rdim=1 cdim=1

OPTION MINLP = COUENNE

*OPTION opctr = 0.01;

 Sets

    i       Línies de tractament       /L0*L2/

    j       Contaminants               /C1*C3/

    k       Clients                    /K1*K2/

    t       Temps                      /t1*t4/

 Parameters

    Costi(i)     Cost de utilitzar la linia 1 per un cabal 1

    MaxQ(i)      Màxim cabal que pot tractar la línia i

    MinQ(i)      Mínim cabal que pot tractar la línia i

    B(k)         Benefici que suposa el client k per un cabal 1

    InC(j,t)     Concentració contaminant j a l'entrada

    InQ (t)      Cabal d'entrada a la planta

    Ef(i,j)      Eficiència de la línia i eliminant j

    MaxC(k,j)    Exigències de qualitat del client k pel contaminant j

    P(k)         Tipus de client k (0 o 1)
```

```
    d(k,t)      Demanda del client k el periode t
$gdxin data.gdx
$load Costi MaxQ MinQ Ef InQ InC B MaxC P d
$gdxin
  Display MaxQ, MinQ, P, B, InC, InQ, Ef, MaxC, d;
  Binary variable
    a(k,t)      Variable auxiliar
  Positive Variables
    X(i,t)      Tant per 1 que va a cada línia i
    Qi(i,t)     Cabal de sortida de cada línia i
    Ci(i,j,t)   Concentració de cada contaminant j a cada línia i
    Y(i,k,t)    Tant per 1 de distribució entre linies i clients (fixable)
    Ck(k,j,t)   Concentració del contaminant j en el corrent pel client k
    Qk(k,t)     Cabal que arriba al client k
    N(t)        Nivell de la llacuna de murtra
  Variable
    z           Benefici OF;
  Equations
    X1              La suma de Xi ha de ser 1
    CalculQi        Càlcul del cabal de sortida de la línia i
    CalculCi        Càlcul de la concentració del contaminant j a la sortida de cada línia i
    RestriccY       Restricció Y 1
```

CalculQk Càlcul del cabal del corrent que va a cada client k pel període t

CalculCk Càlcul de la concentració del corrent que va a cada client k pel període t

Qualitat Cualitat client k pel contaminant j pel període t

Maxcabal Màxim cabal que pot tractar la línia i

Mincabal Mínim cabal que pot tractar la línia i

BigM1 Primera equació de la big M

BigM2 Segona equació de la big M

Cost Objective Function z;

```
X1(t)..                 1 =e= sum(i, X(i,t));

CalculQi(i,t)..         Qi(i,t) =e= X(i,t) * InQ(t);

CalculCi(i,j,t)..       Ci(i,j,t) =e= (1 - Ef(i,j)) * InC(j,t);

RestriccY (i,t)..       1 =e= sum(k, Y(i,k,t));

CalculQk(k,t)..         Qk(k,t) =e= sum(i, Y(i,k,t) * Qi(i,t));

CalculCk(k,j,t)..       Ck(k,j,t) * sum(i, Y(i,k,t) * Qi(i,t)) =e= sum(i, Ci(i,j,t) * Qi(i,t)
* Y(i,k,t));

Qualitat(k,j,t)..       MaxC(k,j) =g= Ck(k,j,t);

Maxcabal(i,t)..         MaxQ(i) =g= Qi(i,t);

Mincabal(i,t)..         MinQ(i) =l= Qi(i,t);

BigM1(k,t)..            (D(k,t) - Qk(k,t)) =l= 9999999 * a(k,t);

BigM2(k,t)..            (Qk(k,t) - D(k,t)) =l= 9999999 * (1-a(k,t));
```

Cost.. z =e= sum(t, sum(k,B(k)*(p(k)*(a(k,t)*Qk(k,t)+(1-a(k,t))*D(k,t))+(1-p(k))*(a(k,t)*(D(k,t)-Qk(k,t))+(1-a(k,t))*(Qk(k,t)-D(k,t))))) - sum(i, Costi(i) * Qi(i,t)));

a.l('K1', t) = 1

Model EDAR2 /all/ ;

solve EDAR2 using MINLP maximizing z;

Display X.l, Qi.l, Qk.l, Ck.l, Ci.l, Y.l, z.l, a.l;

A3. Model 3

*Model 3

$call gdxxrw.exe Model3.xlsx output=data.gdx par=Costi rng=Sheet1!C2:E3 cdim=1 par=MaxQ rng=Sheet1!C5:E6 cdim=1 par=MinQ rng=Sheet1!C8:E9 cdim=1 par=Ef rng=Sheet1!B11:E14 rdim=1 cdim=1 par=InQ rng=Sheet1!H1:AA2 cdim=1 par=InC rng=Sheet1!G4:AA7 cdim=1 rdim=1 par=B rng=Sheet1!H12:J13 cdim=1 par=P rng=Sheet1!H14:J15 cdim=1 par=MaxC rng=Sheet1!G17:J20 rdim=1 cdim=1 par=d rng=Sheet1!G8:AA11 rdim=1 cdim=1

Sets

i Línies de tractament /L0*L2/

j Contaminants /C1*C3/

k Clients /K1*K2/

t Temps /t1*t15/

Parameters

Costi(i) Cost de utilitzar la linia 1 per un cabal 1

MaxQ(i) Màxim cabal que pot tractar la línia i

MinQ(i) Mínim cabal que pot tractar la línia i

B(k) Benefici que suposa el client k per un cabal 1

```
    InC(j,t)      Concentració contaminant j a l'entrada

    InQ (t)       Cabal d'entrada a la planta

    Ef(i,j)       Eficiència de la línia i eliminant j

    MaxC(k,j)     Exigències de qualitat del client k pel contaminant j

    P(k)          Tipus de client k (0 o 1)

    d(k,t)        Demanda del client k el periode t

$gdxin data.gdx

$load Costi MaxQ MinQ Ef InQ InC B MaxC P d

$gdxin

  Display MaxQ, MinQ, P, B, InC, InQ, Ef, MaxC, d;

  Binary variable

    a(k,t)        Variable auxiliar

  Positive Variables

    X(i,t)        Tant per 1 que va a cada línia i

    Qi(i,t)       Cabal de sortida de cada línia i

    Ci(i,j,t)     Concentració de cada contaminant j a cada línia i

    Y(i,k,t)      Tant per 1 de distribució entre linies i clients (fixable)

    Ck(k,j,t)     Concentració del contaminant j en el corrent pel client k

    Qk(k,t)       Cabal que arriba al client k

    f1(k,t)       Variable auxiliar linealitat

    f2(k,t)       Variable auxiliar linealitat

    f3(k,t)       Variable auxiliar linealitat
```

f4(k,t) Variable auxiliar linealitat

Variable

z(t) Benefici OF per periode t

ZZ Benefici OF;

Equations

X1 La suma de Xi ha de ser 1

CalculQi Càlcul del cabal de sortida de la línia i

CalculCi Càlcul de la concentració del contaminant j a la sortida de cada línia i

RestriccY Restricció Y 1

CalculQk Càlcul del cabal del corrent que va a cada client k pel període t

CalculCk Càlcul de la concentració del corrent que va a cada client k pel període t

Qualitat Cualitat client k pel contaminant j pel període t

Maxcabal Màxim cabal que pot tractar la línia i

Mincabal Mínim cabal que pot tractar la línia i

f11 BigM1 f1

f12 BigM2 f1

f21 BigM1 f2

f22 BigM2 f2

f31 BigM1 f3

f32 BigM2 f3

f41 BigM1 f4

f42 BigM2 f4

```
BigM1           Primera equació de la big M

BigM2           Segona equació de la big M


OFt            OF per cada període t

Cost           Objective Function z;

X1(t)..                    1 =e= sum(i, X(i,t));

CalculQi(i,t)..            Qi(i,t) =e= X(i,t) * InQ(t);

CalculCi(i,j,t)..          Ci(i,j,t) =e= (1 - Ef(i,j)) * InC(j,t);

RestriccY (i,t)..          1 =e= sum(k, Y(i,k,t));

CalculQk(k,t)..            Qk(k,t) =e= sum(i, Y(i,k,t) * Qi(i,t));

CalculCk(k,j,t)..          Ck(k,j,t) * sum(i, Y(i,k,t) * Qi(i,t)) =e= sum(i, Ci(i,j,t) * Qi(i,t)
* Y(i,k,t));

Qualitat(k,j,t)..          MaxC(k,j) =g= Ck(k,j,t);

Maxcabal(i,t)..            MaxQ(i) =g= Qi(i,t);

Mincabal(i,t)..            MinQ(i) =l= Qi(i,t);

f11(k,t)..                 f1(k,t) =l= 9999999 * a(k,t);

f12(k,t)..                 f1(k,t) =l= Qk(k,t);

f21(k,t)..                 f2(k,t) =l= 9999999 * (1-a(k,t));

f22(k,t)..                 f2(k,t) =l= D(k,t);

f31(k,t)..                 f3(k,t) =g= 0;

f32(k,t)..                 f3(k,t) =g= (Qk(k,t) - D(k,t));

f41(k,t)..                 f4(k,t) =g= 0;

f42(k,t)..                 f4(k,t) =g= (D(k,t) - Qk(k,t));
```

```
 BigM1(k,t)..                                (D(k,t) - Qk(k,t)) =l= 9999999 * a(k,t);

 BigM2(k,t)..                                (Qk(k,t) - D(k,t)) =l= 9999999 * (1-a(k,t));

 OFt(t)..                          z(t) =e= sum(k,B(k)*(p(k)*(f1(k,t)+f2(k,t))+(1-p(k))*(a(k,t)*(Qk(k,t)
- D(k,t))+(1-a(k,t))*(D(k,t) - Qk(k,t))))) - sum(i, Costi(i) * Qi(i,t));

 Cost..                                           ZZ =e= sum(t, sum(k,B(k)*(p(k)*(f1(k,t)+f2(k,t))+(1-
p(k))*(f3(k,t)+f4(k,t)))) - sum(i, Costi(i) * Qi(i,t)));

 Model EDAR3 /all/ ;

*OPTION MINLP = COUENNE

OPTION MINLP = DICOPT;

*OPTION opctr = 0.01;

EDAR4.optfile=1;

$onecho > dicopt.opt

maxcycles 100

stop 0

$offecho

 solve EDAR3 using MINLP maximizing ZZ;

 Display X.l, Qi.l, Qk.l, Ck.l, Ci.l, Y.l, z.l, ZZ.l, a.l;

FILE ID /ResultatsM3.xls/;

PUT ID;

ID.pc = 6;

ID.pw = 32767;

PUT 'ResultatsM3CS4couenne'/;

PUT '-----------'//;
```

```
PUT 'CPU(s)','nequations','single var','bin var','model status','solver status','OF'/;

PUT
EDAR4.resusd,EDAR4.numequ,EDAR4.numvar,EDAR4.numdvar,EDAR4.modelstat,EDAR4.solvestat,ZZ
.l//;

PUT 'FO', PUT ZZ.l, PUT /;

PUT '' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

PUT 'z' loop(t, PUT z.l(t)) PUT//;

PUT 'InC' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(j, PUT j.tl loop(t, PUT InC(j,t)) PUT/);

PUT 'InQ' loop(t, PUT InQ(t)) PUT//;

PUT 'X' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(i, PUT i.tl loop(t, PUT X.l(i,t)) PUT/) PUT /;

PUT 'Qi'  loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(i, PUT i.tl loop(t, PUT Qi.l(i,t))PUT /) PUT /;

PUT '' loop(i, PUT i.tl) PUT /;

PUT 'MaxQ' loop(i, PUT MaxQ(i)) PUT /;

PUT 'MinQ' loop(i, PUT MinQ(i)) PUT //;

PUT 'Y' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl PUT/ loop(i, PUT i.tl loop(t, PUT Y.l(i,k,t)) PUT/)) PUT //;

PUT 'Ef' loop(j, PUT j.tl) PUT /;

loop(i, PUT i.tl loop(j, PUT Ef(i,j)) PUT/) PUT /;

PUT 'D' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl loop(t, PUT D(k,t)) PUT/);
```

```
PUT 'Qk' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl loop(t, PUT Qk.l(k,t)) PUT/) PUT /;

PUT 'a' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl loop(t, PUT a.l(k,t)) PUT/) PUT /;

PUT 'Ci' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(i, PUT i.tl PUT/ loop(j, PUT j.tl loop(t, PUT Ci.l(i,j,t)) PUT/)) PUT //;

PUT '' loop(k, PUT k.tl) PUT /;

PUT 'B' loop(k, PUT B(k)) PUT /;

PUT 'Ck' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl PUT / loop(j, PUT j.tl loop(t, PUT Ck.l(k,j,t)) PUT/)) PUT //;

PUT 'MaxCk' PUT '' loop(j, PUT j.tl) PUT /;

PUT '' loop(k, PUT k.tl loop(j, PUT MaxC(k,j)) PUT/ PUT '') PUT /;
```

A4. Model 4

```
*Model 4

$call gdxxrw.exe Model4.xlsx output=data.gdx set=t rng=Sett!A1:GZ200 rdim=1 set=i rng=Seti!A1:GZ200 rdim=1 set=j rng=Setj!A1:GZ200 rdim=1 set=K rng=SetK!A1:GZ200 rdim=1 set=R rng=SetR!A1:GZ200 rdim=1 set=iR rng=SetiR!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=InQ rng=InQ!A2:GZ200 rdim=1 par=InC rng=InC!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=CostA rng=CostA!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=CostB rng=CostB!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MaxQ rng=MaxQ!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MinQ rng=MinQ!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MaxCin rng=MaxCin!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MinCin rng=MinCin!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MaxCout rng=MaxCout!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MaxEf rng=MaxEf!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MinEf rng=MinEf!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MaxC rng=MaxC!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=Psup rng=Psup!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=Binf rng=Binf!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=Pinf rng=Pinf!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=D rng=D!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1
```

Sets

R	Receptes (Modes d'operació de les línies)
i	Línies de tractament
j	Contaminants
k	Clients
t	Temps
iR(i,R)	Correspondència recepta-línia

Parameters

InQ (t)	Cabal d'entrada a la planta
InC(j,t)	Concentració contaminant j a l'entrada
Cjs(j,R)	Concentració contaminant j a la sortida de la recepta R
CostA(R,t)	Pendent de la funció cost per la recepta R
CostB(R,t)	Ordenada a l'origen de la funció cost per la recepta R
MaxQ(R,t)	Màxim cabal que pot tractar la línia i
MinQ(R,t)	Mínim cabal que pot tractar la línia i
MaxCin(j,R)	Màxima concentració del contaminant j a l'entrada de la recepta R
MinCin(j,R)	Mínima concentració del contaminant j a l'entrada de la recepta R
MaxCout(j,R)	Mínima concentració del contaminant j a la sortida de la recepta R
MaxEf(j,R)	Màxima eficiència assolible per la recepta R eliminant j
MinEf(j,R)	Mínima eficiència assolible per la recepta R eliminant j
MaxC(j,k)	Exigències de qualitat del client k pel contaminant j
d(k,t)	Demanda del client k el periode t

Psup(k,t)   Benefici que suposa el client k per unitat de cabal per sobre la demanda

Binf(k,t)   Benefici que suposa el client k per unitat de cabal per sota la demanda

Pinf(k,t)   Penalització que suposa el client k per unitat de cabal que falta per satisfer la demanda

$gdxin data.gdx

$load R i j k t iR InQ InC CostA CostB MaxQ MinQ MaxCin MinCin MaxCout MaxEf MinEf MaxC d Psup Binf Pinf

$gdxin

Display R, i, j, k, t, iR, InQ, InC, CostA, CostB, MaxQ, MinQ, MaxCin, MinCin, MaxCout, MaxEf, MinEf, MaxC, d, Psup, Binf, Pinf;

*$ontext

Binary variable

a(k,t)   Variable auxiliar

b(R,t)   Variable auxiliar

Positive Variables

X(i,t)   Tant per 1 que va a cada línia i

Qi(i,t)   Cabal de sortida de cada línia i

QR(R,t)   Cabal de sortida de cada recepta R

CR(R,j,t)   Concentració de cada contaminant j a la recepta R

Ci(i,j,t)   Concentració de cada contaminant j a la línia i

Ef(j,R,t)   Eficiència de la recepta R eliminant el contaminant j

Y(i,k,t)   Tant per 1 de distribució entre línies i clients (fixable)

Ck(k,j,t)   Concentració del contaminant j en el corrent pel client k

Qk(k,t)   Cabal que arriba al client k

Variable

z(t) Benefici OF per periode t

ZZ Benefici OF;

Equations

X1 La suma de Xi ha de ser 1

CalculQi Càlcul del cabal que es tracta amb la recepta R

RestriccY Restricció Y 1

CalculQk Càlcul del cabal del corrent que va a cada client k pel període t

CalculCk Càlcul de la concentració del corrent que va a cada client k pel període t

Qualitat Cualitat client k pel contaminant j pel període t

Maxcabal Màxim cabal que pot tractar la línia i

Mincabal Mínim cabal que pot tractar la línia i

aBigM1 Primera equació de la big M per a

aBigM2 Segona equació de la big M per a

bBigM1 Primera equació de la big M per b

bBigM2 Segona equació de la big M per b

EqMaxCin as

EqMinCin asd

EqMaxCout asdfd

EqMaxEf asdf

EqMinEf yygh

b1 asdf

```
     b2            asdfg

     b3            asdfgh

     b4            asdfghj

     OFt           OF per cada període t

     OF            Objective Function z;

X1(t)..                                 1 =e= sum(i, X(i,t));

CalculQi(i,t)..                         Qi(i,t) =e= X(i,t) * InQ(t);

RestriccY (i,t)..                       1 =e= sum(k, Y(i,k,t));

CalculQk(k,t)..                         Qk(k,t) =e= sum(i, Y(i,k,t) * Qi(i,t));

CalculCk(k,j,t)..                       Ck(k,j,t) * sum(i, Y(i,k,t) * Qi(i,t)) =e= sum(i, Ci(i,j,t) * Qi(i,t)
* Y(i,k,t));

Qualitat(k,j,t)..                       MaxC(j,k) =g= Ck(k,j,t);

Maxcabal(i,R,t)..                       MaxQ(R,t) =g= QR(R,t) * b(R,t);

Mincabal(R,t)..                         MinQ(R,t) * b(R,t) =l= QR(R,t);

aBigM1(k,t)..                           (D(k,t) - Qk(k,t)) =l= 9999 * a(k,t);

aBigM2(k,t)..                           (Qk(k,t) - D(k,t)) =l= 9999 * (1-a(k,t));

bBigM1(R,t)..                           QR(R,t) =l= 9999 * b(R,t);

bBigM2(R,t)..                           -QR(R,t) =l= 9999 * (1-b(R,t));

EqMaxCin(j,R,t)..                       MaxCin(j,R) =g= InC(j,t) * b(R,t);

EqMinCin(j,R,t)..                       MinCin(j,R) * b(R,t) =l= InC(j,t);

EqMaxCout(i,j,R,t)$iR(i,R)..            MaxCout(j,R) =g= Ci(i,j,t) * b(R,t);

EqMaxEf(R,j,t)..                        MaxEf(j,R) =g= Ef(j,R,t) * b(R,t);

EqMinEf(R,j,t)..                        MinEf(j,R) * b(R,t) =l= Ef(j,R,t);
```

```
b1(i,t)..                 1 =e= sum(R, b(R,t)*iR(i,R));

b2(i,R,t)$iR(i,R)..       QR(R,t) =e= b(R,t)*Qi(i,t);

b3(j,R,t)..               CR(R,j,t) =e= b(R,t)*((1 - Ef(j,R,t)) * InC(j,t));

b4(i,j,t)..               Ci(i,j,t) =e= sum(R, CR(R,j,t)*iR(i,R));

OFt(t)..                  z(t) =e= sum(k,a(k,t)*(Binf(k,t)*Qk(k,t)-Pinf(k,t)*(D(k,t)-Qk(k,t))) - (1-a(k,t))*(Psup(k,t)*(Qk(k,t)-D(k,t)))) - sum(R, (CostA(R,t)*(sum(j,Ef(j,R,t))/card(j))+CostB(R,t))*QR(R,t));

OF..                      ZZ =e= sum(t, z(t));

Model EDAR4 /all/ ;

a.l('K1',t) = 1;

a.l('K2',t) = 0;

b.l('R1',t) = 1;

b.l('R5',t) = 1;

X.l('L1',t)=1;

X.l('L2',t)=0;

Qi.l(i,t) = X.l(i,t) * InQ(t);

QR.l('R1',t) = Qi.l('L1',t);

Ef.l(j,R,t) = 1;

CR.l('R1',j,t) = b.l('R1',t) * ((1 - Ef.l(j,'R1',t)) * InC(j,t));

Ci.l('L1',j,t) = sum(R, CR.l(R,j,t));

Y.l('L1','K2',t) = 1;

Ck.L(k,j,t) = Ci.l('L1',j,t);

Qk.l(k,t) = sum(i, Y.l(i,k,t) * Qi.l(i,t));
```

```
z.l(t)  =  sum(k,a.l(k,t)*(Binf(k,t)*Qk.l(k,t)-Pinf(k,t)*(D(k,t)-Qk.l(k,t)))  +  (1-a.l(k,t))*(Psup(k,t)*(Qk.l(k,t)-D(k,t)))) - sum(R, (CostA(R,t)*(sum(j,Ef.l(j,R,t))/card(j))+CostB(R,t))*b.l(R,t)*QR.l(R,t));

ZZ.l = sum(t, z.l(t));

OPTION MINLP = DICOPT;

EDAR2.optfile=1;

$onecho > dicopt.opt

maxcycles 500

stop 0

$offecho

 solve EDAR4 using MINLP maximizing ZZ;

 Display X.l, Qi.l, Qk.l, QR.l, Ck.l, Ci.l, Cr.l, Y.l, z.l, ZZ.l, a.l, b.l, Ef.l;

FILE ID /ResultatsM2t3 costA*10.xls/;

PUT ID;

ID.pc = 6;

ID.pw = 32767;

PUT 'ResultatsM4t3DICOPT'/;

PUT '-----------'//;

PUT 'CPU(s)','nequations','single var','bin var','model status','solver status','OF'/;

PUT
EDAR2.resusd,EDAR2.numequ,EDAR2.numvar,EDAR2.numdvar,EDAR2.modelstat,EDAR2.solvestat,ZZ
.l//;

PUT 'FO', PUT ZZ.l, PUT /;

PUT '' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

PUT 'z' loop(t, PUT z.l(t)) PUT//;
```

```
PUT 'InC' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(j, PUT j.tl loop(t, PUT InC(j,t)) PUT/);

PUT 'InQ' loop(t, PUT InQ(t)) PUT//;

PUT 'X' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(i, PUT i.tl loop(t, PUT X.l(i,t)) PUT/) PUT /;

PUT 'Qi'  loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(i, PUT i.tl loop(t, PUT Qi.l(i,t))PUT /) PUT /;

PUT 'Ci', PUT'', loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(i, loop(j,  PUT i.tl, PUT j.tl loop(t, PUT Ci.l(i,j,t)) PUT/)) PUT //;

PUT 'b'  loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(R, PUT R.tl loop(t, PUT b.l(R,t))PUT /) PUT /;

PUT 'QR'  loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(R, PUT R.tl loop(t, PUT QR.l(R,t))PUT /) PUT /;

PUT 'CR' PUT'' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(R, loop(j,  PUT R.tl, PUT j.tl loop(t, PUT CR.l(R,j,t)) PUT/)) PUT //;

PUT 'MaxQ'  loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(R, PUT R.tl loop(t, PUT MaxQ(R,t))PUT /) PUT /;

PUT 'MinQ'  loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(R, PUT R.tl loop(t, PUT MinQ(R,t))PUT /) PUT //;

PUT 'Y' PUT '' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, loop(i, PUT k.tl, PUT i.tl loop(t, PUT Y.l(i,k,t)) PUT/)) PUT //;

PUT 'Ef' PUT'' loop(t, PUT t.tl) PUT /;
```

```
loop(R, loop(j, PUT R.tl, PUT j.tl loop(t, PUT Ef.l(j,R,t)) PUT/)) PUT //;

PUT 'D' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl loop(t, PUT D(k,t)) PUT/);

PUT 'Qk' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl loop(t, PUT Qk.l(k,t)) PUT/) PUT /;

PUT 'a' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl loop(t, PUT a.l(k,t)) PUT/) PUT /;

PUT 'Ck' PUT'' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, loop(j, PUT k.tl, PUT j.tl loop(t, PUT Ck.l(k,j,t)) PUT/)) PUT //;
```

A5. Model 5

```
*Model 5

$call gdxxrw.exe Model6.xlsx output=data.gdx set=t rng=Sett!A1:GZ200 rdim=1 set=i rng=Seti!A1:GZ200 rdim=1 set=j rng=Setj!A1:GZ200 rdim=1 set=K rng=SetK!A1:GZ200 rdim=1 set=R rng=SetR!A1:GZ200 rdim=1 set=iR rng=SetiR!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=InQ rng=InQ!A1:GZ200 rdim=1 par=InC rng=InC!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=CostA rng=CostA!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=CostB rng=CostB!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MaxQ0 rng=MaxQ0!A1:GZ200 rdim=1 par=MinQ rng=MinQ!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MaxCin rng=MaxCin!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MinCin rng=MinCin!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MaxCout rng=MaxCout!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MaxEf rng=MaxEf!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MinEf rng=MinEf!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MaxC rng=MaxC!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=Bsup rng=Bsup!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=Binf rng=Binf!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=Pinf rng=Pinf!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=D rng=D!A1:GZ200 rdim=1 cdim=1 par=MaxEC rng=Exp!A1:B100 rdim=1 par=MinEC rng=Exp!D1:E100 rdim=1 par=Alpha rng=Exp!G1:H100 rdim=1 par=Beta rng=Exp!J1:K100 rdim=1 par=MaxExp rng=Exp!M1:N100 rdim=1

 Sets

    R        Receptes (Modes d'operació de les línies)

    i        Línies de tractament
```

j Contaminants

k Clients

t Temps

iR(i,R) ASDF

Parameters

InQ (t) Cabal d'entrada a la planta

InC(j,t) Concentració contaminant j a l'entrada

Cjs(j,R) Concentració contaminant j a la sortida de la recepta R

CostA(R,t) Pendent de la funció cost per la recepta R

CostB(R,t) Ordenada a l'origen de la funció cost per la recepta R

MaxQ0(i) Màxim cabal que pot tractar la línia i

MinQ(i,t) Mínim cabal que pot tractar la línia i

MaxCin(j,R) Màxima concentració del contaminant j a l'entrada de la recepta R

MinCin(j,R) Mínima concentració del contaminant j a l'entrada de la recepta R

MaxCout(j,R) Mínima concentració del contaminant j a la sortida de la recepta R

MaxEf(j,R) Màxima eficiència assolible per la recepta R eliminant j

MinEf(j,R) Mínima eficiència assolible per la recepta R eliminant j

MaxC(j,k) Exigències de qualitat del client k pel contaminant j

d(k,t) Demanda del client k el periode t

Bsup(k,t) Benefici que suposa el client k per unitat de cabal per sobre la demanda

Binf(k,t) Benefici que suposa el client k per unitat de cabal per sota la demanda

Pinf(k,t) Penalització que suposa el client k per unitat de cabal que falta per satisfer la demanda

MaxEC(i) Màxima expansió que pot assolir la línia i en un período t

MinEC(i) Màxima expansió que pot assolir la línia i (de experimentarla) en un período t

Alpha(i) Paràmetre alpha cost expansió

Beta(i) Paràmetre beta cost expansió

MaxExp(i) Màxim número d'expansions per la línia i

$gdxin data.gdx

$load R i j k t iR InQ InC CostA CostB MaxQ0 MinQ MaxCin MinCin MaxCout MaxEf MinEf MaxC d Bsup Binf Pinf MaxEC MinEC Alpha Beta MaxExp

$gdxin

Display R, i, j, k, t, iR, InQ, InC, CostA, CostB, MaxQ0, MinQ, MaxCin, MinCin, MaxCout, MaxEf, MinEf, MaxC, d, Bsup, Binf, Pinf, MaxEC, MinEC, Alpha, Beta;

Binary variable

a(k,t) Variable auxiliar

b(R,t) Variable auxiliar

Exp(i,t) Variable auxiliar

Positive Variables

X(i,t) Tant per 1 que va a cada línia i

Qi(i,t) Cabal de sortida de cada línia i

QR(R,t) Cabal de sortida de cada recepta R

CR(R,j,t) Concentració de cada contaminant j a la recepta R

Ci(i,j,t) Concentració de cada contaminant j a la línia i

Ef(j,R,t) Eficiència de la recepta R eliminant el contaminant j

Y(i,k,t) Tant per 1 de distribució entre receptes i clients (fixable)

Ck(k,j,t) Concentració del contaminant j en el corrent pel client k

Qk(k,t) Cabal que arriba al client k

EC(i,t) Expansió de la capacitat de la línia i que es produeix al període t

MaxQ(i,t) Màxima cabacitat de la linia i en el període t

Variable

z(t) Benefici OF per periode t

ZZ Benefici OF;

Equations

X1 La suma de Xi ha de ser 1

CalculQi Càlcul del cabal que es tracta amb la recepta R

RestriccY Restricció Y 1

CalculQk Càlcul del cabal del corrent que va a cada client k pel període t

CalculCk Càlcul de la concentració del corrent que va a cada client k pel període t

Qualitat Cualitat client k pel contaminant j pel període t

Maxcabal Màxim cabal que pot tractar la línia i

M6MaxQ0 Expansió de la línia i al període t1

M6MaxQ Expansió de la línia i als períodes restants

ExpBigM BigM

MaxECeq Maxima expansió de la línia i

MinECeq Minima expansió de la línia i

MxExp Número màxim d'expansions

Mincabal Mínim cabal que pot tractar la línia i aBigM1 Primera equació de la big M per a

aBigM2 Segona equació de la big M per a

EqMaxCin as

EqMinCin asd

EqMaxCout asdfd

EqMaxEf asdf

EqMinEf yygh

b1 asdf

b2 asdfg

b3 asdfgh

b4 asdfghj

OFt OF per cada període t

OF Objective Function z;

```
X1(t)..                    1 =e= sum(i, X(i,t));

 CalculQi(i,t)..           Qi(i,t) =e= X(i,t) * InQ(t);

* CalculCi(i,j,t)..        Ci(i,j,t) =e= (1 - Ef(i,j)) * InC(j,t);

 RestriccY (i,t)..         1 =e= sum(k, Y(i,k,t));

 CalculQk(k,t)..           Qk(k,t) =e= sum(i, Y(i,k,t) * Qi(i,t));

 CalculCk(k,j,t)..         Ck(k,j,t) * sum(i, Y(i,k,t) * Qi(i,t)) =e= sum(i, Ci(i,j,t) * Qi(i,t)
* Y(i,k,t));

 Qualitat(k,j,t)..         MaxC(j,k) =g= Ck(k,j,t);

 Maxcabal(i,R,t)$iR(i,R)..     MaxQ(i,t) =g= Qi(i,t);

M6MaxQ0(i,t)$(ord(t)=1)..      MaxQ(i,t) =e= MaxQ0(i) + EC(i,t) * Exp(i,t);
```

```
M6MaxQ(i,t)$(ord(t)>1)..          MaxQ(i,t) =e= MaxQ(i,t-1) + EC(i,t) * Exp(i,t);

ExpBigM(i,t)..                    999999 * Exp(i,t) =g= EC(i,t);

MaxECeq(i,t)..                    MaxEC(i) =g= EC(i,t);

MinECeq(i,t)..                    MinEC(i) * Exp(i,t) =l= EC(i,t);

MxExp(i)..                        sum(t, Exp(i,t)) =l= MaxExp(i);

Mincabal(i,R,t)..                 MinQ(i,t) =l= Qi(i,t);

aBigM1(k,t)..                     (D(k,t) - Qk(k,t)) =l= 999999 * a(k,t);

aBigM2(k,t)..                     (Qk(k,t) - D(k,t)) =l= 999999 * (1-a(k,t));

EqMaxCin(j,R,t)..                 MaxCin(j,R) =g= InC(j,t) * b(R,t);

EqMinCin(j,R,t)..                 MinCin(j,R) * b(R,t) =l= InC(j,t);

EqMaxCout(i,j,R,t)$iR(i,R)..      MaxCout(j,R) =g= Ci(i,j,t) * b(R,t);

EqMaxEf(R,j,t)..                  MaxEf(j,R) =g= Ef(j,R,t) * b(R,t);

EqMinEf(R,j,t)..                  MinEf(j,R) * b(R,t) =l= Ef(j,R,t);

b1(i,t)..                         1 =e= sum(R, b(R,t)*iR(i,R));

b2(i,R,t)$iR(i,R)..               QR(R,t) =e= b(R,t)*Qi(i,t);

b3(j,R,t)..                       CR(R,j,t) =e= b(R,t)*((1 - Ef(j,R,t)) * InC(j,t));

b4(i,j,t)..                       Ci(i,j,t) =e= sum(R, CR(R,j,t)*iR(i,R));

OFt(t)..                          z(t) =e= sum(k,a(k,t)*(Binf(k,t)*Qk(k,t)-Pinf(k,t)*(D(k,t)-
Qk(k,t))) + (1-a(k,t))*(Binf(k,t)*D(k,t) + Bsup(k,t)*(Qk(k,t)-D(k,t)))) - sum(R,
(CostA(R,t)*(sum(j,Ef(j,R,t))/card(j))+CostB(R,t))*b(R,t)*QR(R,t)) - sum(i, Alpha(i)*EC(i,t) +
Beta(i)*Exp(i,t));

* OFt(t)..                        z(t) =e= sum(k,a(k,t)*(Binf(k,t)*Qk(k,t)-Pinf(k,t)*(D(k,t)-
Qk(k,t))) + (1-a(k,t))*(Bsup(k,t)*(Qk(k,t)-D(k,t)))) - sum(R,
(CostA(R,t)*(sum(j,CR(R,j,t)))+CostB(R,t))*b(R,t)*QR(R,t));
```

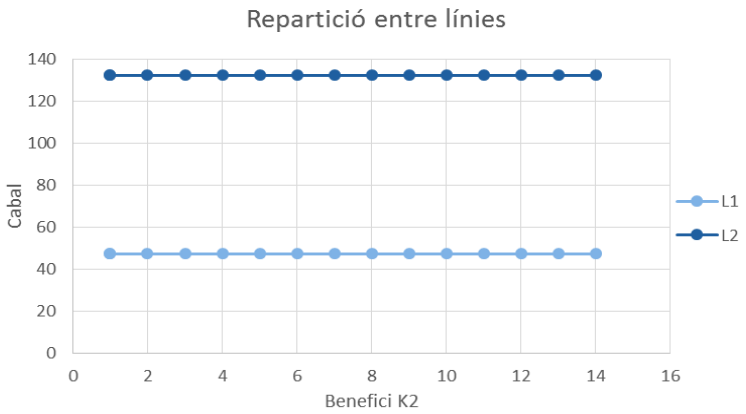
```
OF..                    ZZ =e= sum(t, z(t));

Model EDAR5 /all/ ;

*Bounds

Ef.up(j,R,t) = 1;

Ef.lo(j,R,t) = 0;

Y.up(i,k,t) = 1;

Y.lo(i,k,t) = 0;

Qk.up(k,t) = 999999;

Qk.lo(k,t) = 0;

EC.lo(i,t) = 0;

MaxQ.lo(i,t) = 0;

MaxQ.up(i,t) = 999999;

OPTION MINLP = BARON;

OPTION optcr = 0.01;

option reslim = 20000;

solve EDAR5 using MINLP maximizing ZZ;

Display X.l, Qi.l, Qk.l, QR.l, Ck.l, Ci.l, Cr.l, Y.l, z.l, ZZ.l, a.l, b.l, Ef.l, EC.l, Exp.l, MaxQ.l;

FILE ID /ResultatsM5GV.xls/;

PUT ID;

ID.pc = 6;

ID.pw = 32767;

PUT 'ResultatsM6 GAVA-VILADECANS'/;
```

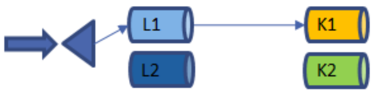
```
PUT '-----------'//;

PUT 'CPU(s)','nequations','single var','bin var','model status','solver status','OF'/;

PUT
EDAR6.resusd,EDAR6.numequ,EDAR6.numvar,EDAR6.numdvar,EDAR6.modelstat,EDAR6.solvestat,ZZ
.l//;

PUT 'FO', PUT ZZ.l, PUT /;

PUT '' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

PUT 'z' loop(t, PUT z.l(t)) PUT//;

PUT 'InC' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(j, PUT j.tl loop(t, PUT InC(j,t)) PUT/);

PUT 'InQ' loop(t, PUT InQ(t)) PUT//;

PUT 'X' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(i, PUT i.tl loop(t, PUT X.l(i,t)) PUT/) PUT /;

PUT 'Qi'  loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(i, PUT i.tl loop(t, PUT Qi.l(i,t))PUT /) PUT /;

PUT '' loop(i, PUT i.tl) PUT /;

PUT 'MaxQ0' loop(i, PUT MaxQ0(i)) PUT /;

PUT 'MaxQ' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(i, PUT i.tl loop(t, PUT MaxQ.l(i,t)) PUT/) PUT /;

PUT 'EC' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(i, PUT i.tl loop(t, PUT EC.l(i,t)) PUT/) PUT /;

PUT 'MinQ' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(i, PUT i.tl loop(t, PUT MinQ(i,t)) PUT/) PUT /;
```

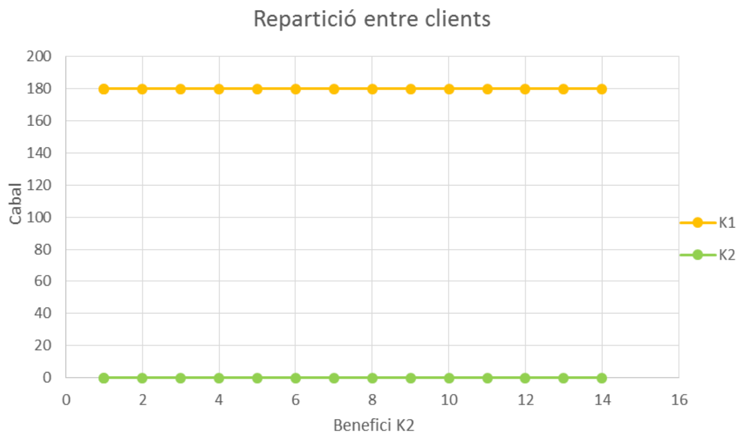
```
PUT 'Y' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl PUT/ loop(i, PUT i.tl loop(t, PUT Y.l(i,k,t)) PUT/)) PUT //;

PUT 'Ef' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(j, PUT j.tl PUT/ loop(R, PUT R.tl loop(t, PUT Ef.l(j,R,t)) PUT/)) PUT //;

PUT 'D' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl loop(t, PUT D(k,t)) PUT/);

PUT 'Qk' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl loop(t, PUT Qk.l(k,t)) PUT/) PUT /;

PUT 'a' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl loop(t, PUT a.l(k,t)) PUT/) PUT /;

PUT 'Ci' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(i, PUT i.tl PUT/ loop(j, PUT j.tl loop(t, PUT Ci.l(i,j,t)) PUT/)) PUT //;

PUT '' loop(k, PUT k.tl) PUT /;

PUT 'Ck' loop(t, PUT t.tl) PUT /;

loop(k, PUT k.tl PUT / loop(j, PUT j.tl loop(t, PUT Ck.l(k,j,t)) PUT/)) PUT //;

PUT 'MaxCk' PUT '' loop(j, PUT j.tl) PUT /;

PUT '' loop(k, PUT k.tl loop(j, PUT MaxC(j,k)) PUT/ PUT '') PUT /;
```

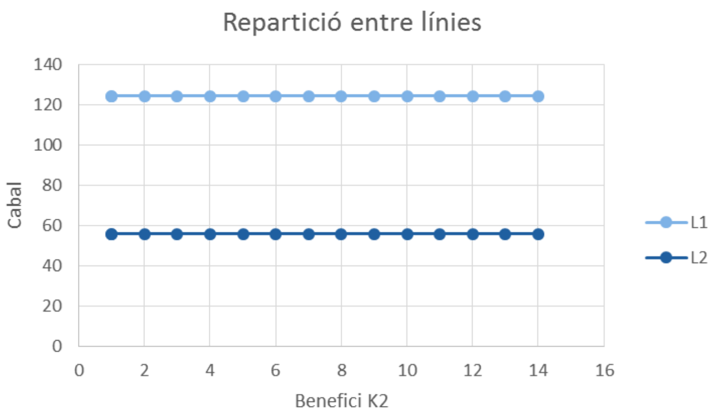
Annex B

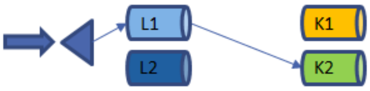
B1. Primer set de punts inicials Cas d'estudi 2 Model 2

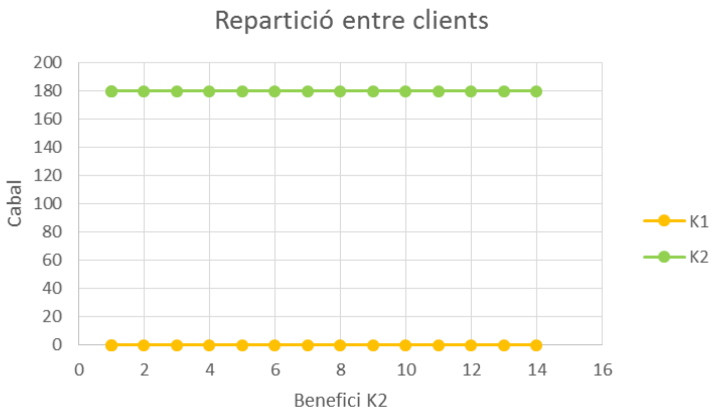


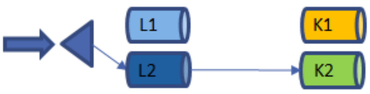


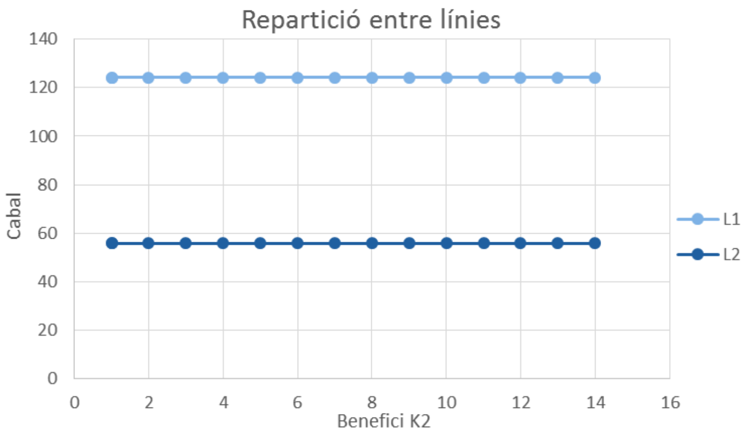


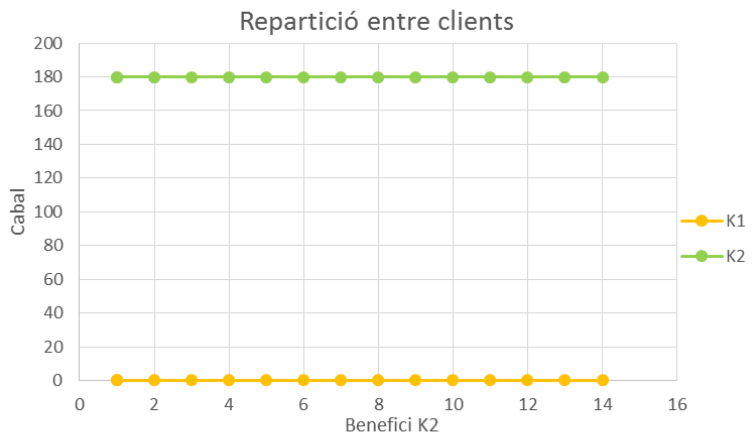

Repartició entre línies
Cabal
Benefici K2
L1
L2
0
20
40
60
80
100
120
140
0
2
4
6
8
10
12
14
16


L1
L2
K1
K2

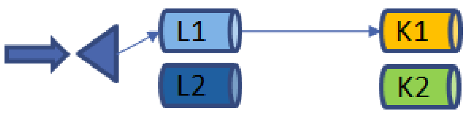

Repartició entre clients
Cabal
Benefici K2
K1
K2
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
200
0
2
4
6
8
10
12
14
16


L1
L2
K1
K2

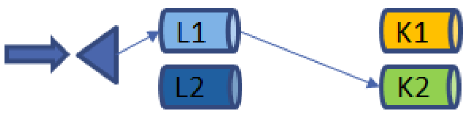

Repartició entre línies
Cabal
Benefici K2
L1
L2
0
20
40
60
80
100
120
140
0
2
4
6
8
10
12
14
16

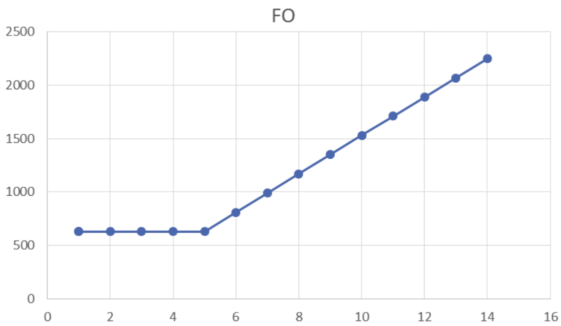


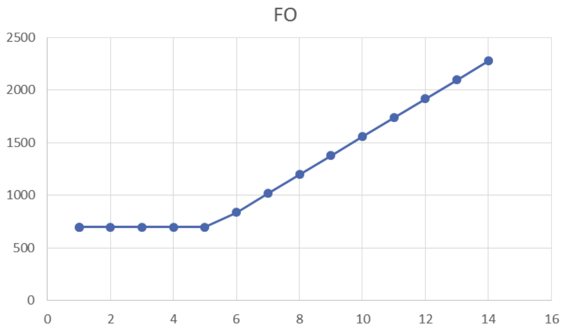
B2. Segon set de punts inicials Cas d'estudi 2 Model 2

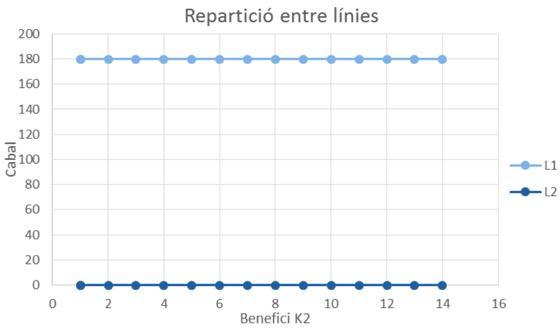


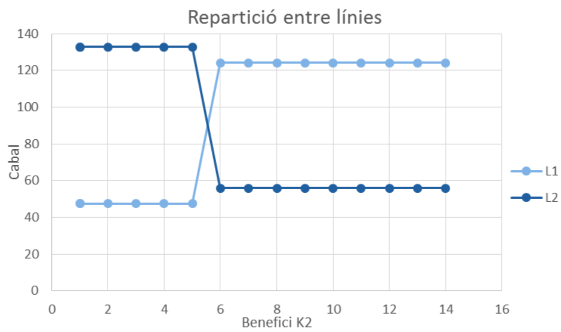
$$B_{K2} = 6$$

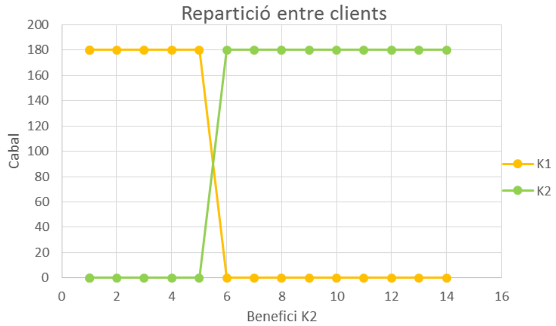


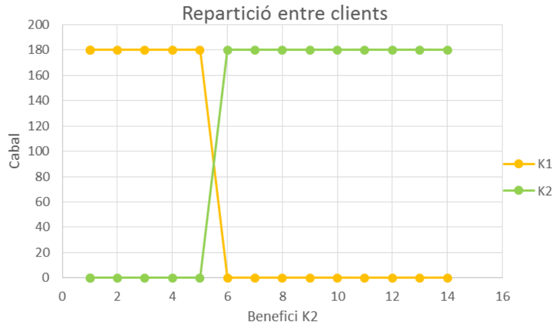


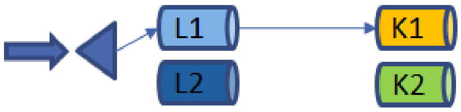




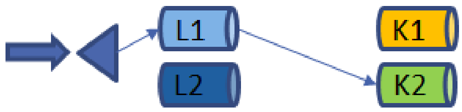


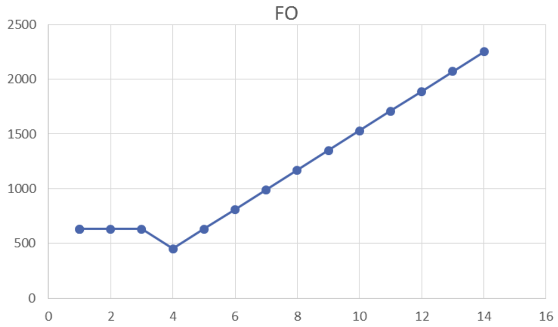

Repartició entre clients
Cabal
Benefici K2
K1
K2

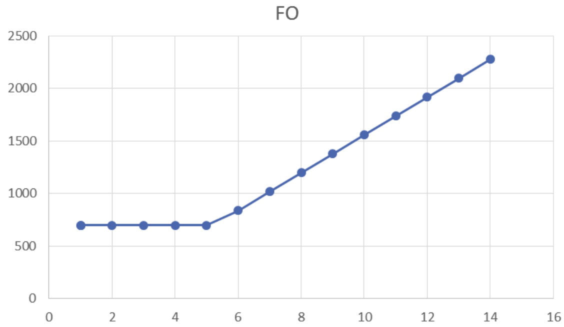

Repartició entre clients
Cabal
Benefici K2
K1
K2

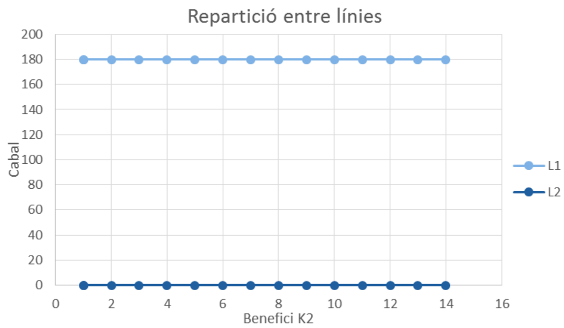

L1
L2
K1
K2

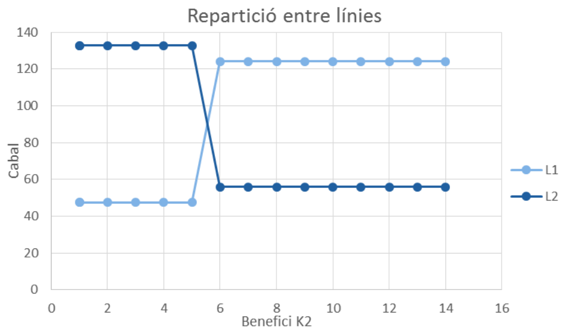
$$B_{K2} = 4$$

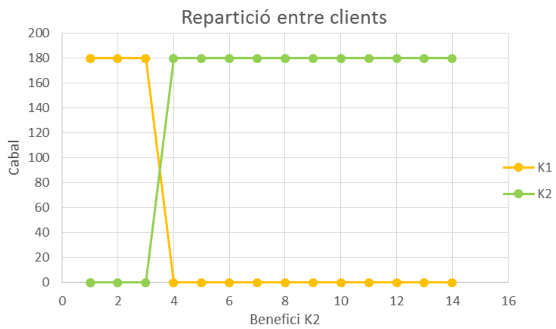

L1
L2
K1
K2

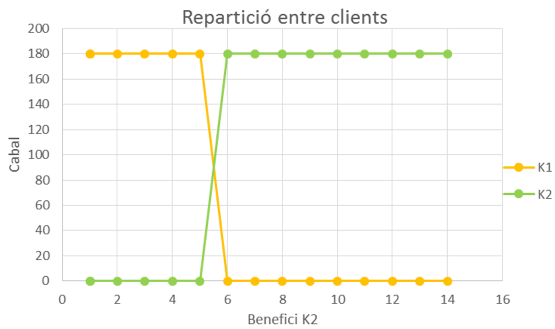

FO

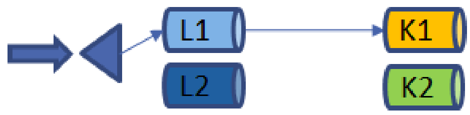

FO


Repartició entre línies
Cabal
Benefici K2
L1
L2

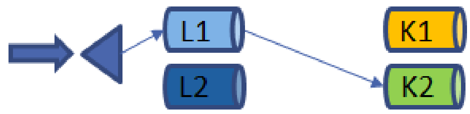

Repartició entre línies
Cabal
Benefici K2
L1
L2

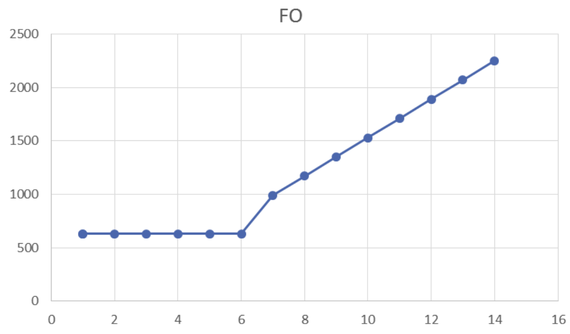

Repartició entre clients
Cabal
Benefici K2
K1
K2

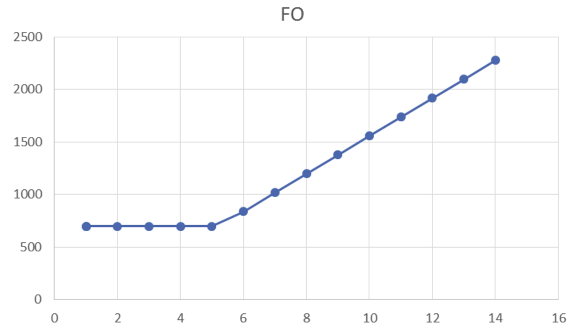

Repartició entre clients
Cabal
Benefici K2
K1
K2

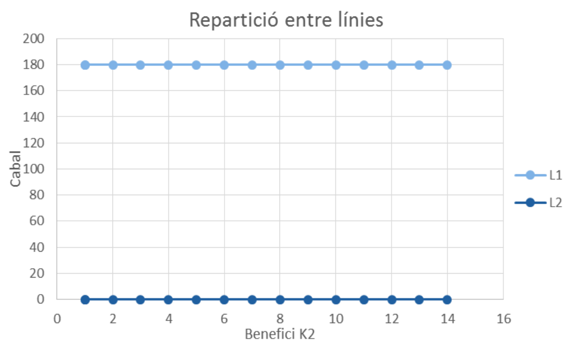

L1
L2
K1
K2

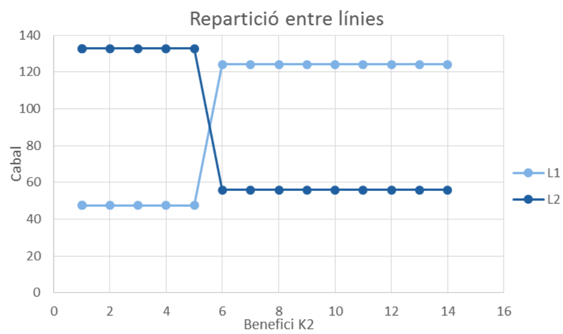
$$B_{K2} = 7$$

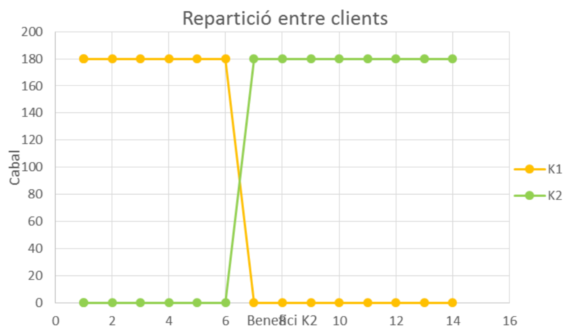

L1
L2
K1
K2


FO

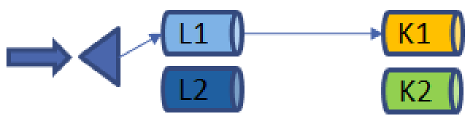

FO


Repartició entre línies
Cabal
Benefici K2
L1
L2

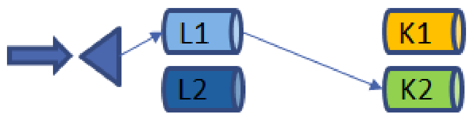

Repartició entre línies
Cabal
Benefici K2
L1
L2

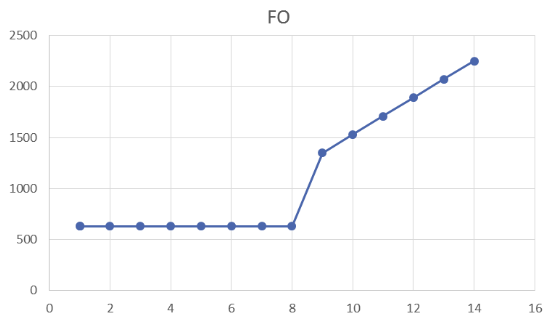

Repartició entre clients
Cabal
Benefici K2
K1
K2

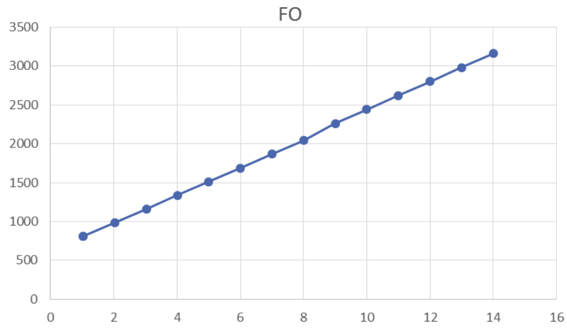

Repartició entre clients
Cabal
Benefici K2
K1
K2

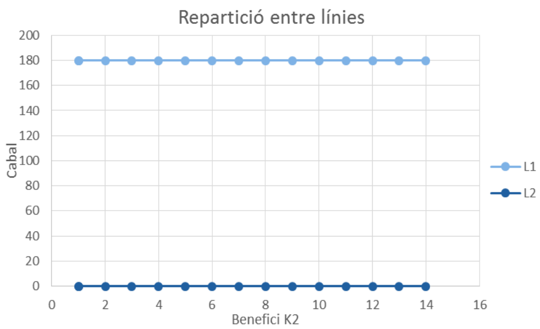

L1
L2
K1
K2

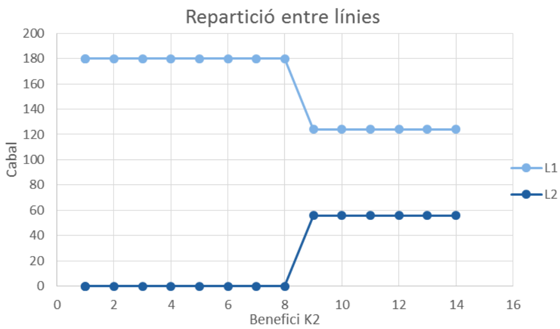
$$B_{K2} = 9$$


L1
L2
K1
K2

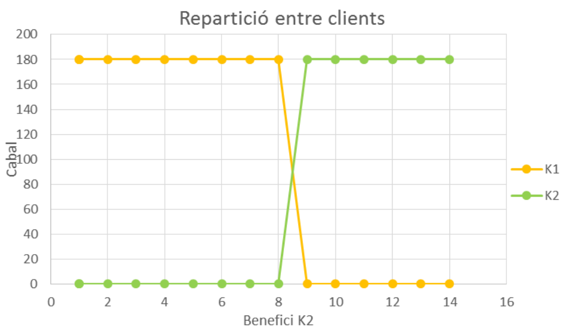

FO


FO


Repartició entre línies
Cabal
Benefici K2
L1
L2


Repartició entre línies
Cabal
Benefici K2
L1
L2


Repartició entre clients
Cabal
Benefici K2
K1
K2


Repartició entre clients
Cabal
Benefici K2
K1
K2